

A kvantum-színdinamika fázisdiagramja

DOKTORI ÉRTEKEZÉS

Katz Sándor

*Eötvös Loránd Tudományegyetem, Fizikai Intézet,
Elméleti Fizikai Tanszék*

2007.

Köszönetnyilvánítás

Köszönettel tartozom Fodor Zoltánnak, akivel együtt kezdtünk el dolgozni a QCD fázisdiagramjának vizsgálatán. Ez a közös munka, melynek során számos él-ménnyel lettem gazdagabb, ma is tart. A munkán túlmenően magánemberként is mindig számíthattam rá.

Hálás vagyok Csikor Ferencnek, tanáromnak és kollégámnak, aki türelmes és megértő tanszékvezetőként sokat segített beilleszkedésemben. Beszélgetéseink során sokat tanultam. Köszönöm Szabó Kálmánnak, hogy akár hajnali órákban is kész volt érdekes problémákat megvitatni. Köszönöm továbbá szerzőtársaimnak, Yasumichi Aokinak, Egri Győzőnek, Endrődi Gergelynek és Tóth Annának a közös munka lehetőségét, az élvezetes és inspiráló beszélgetéseket.

Munkámat az ELTE Elméleti Fizikai Tanszékén, a DESY Elméleti Osztályán és a Wuppertali Egyetem Elméleti Fizikai Tanszékén végeztem. Minden kollégámnak hálás vagyok a kellemes légkörért.

A kutatásokat az T22929, T28413, T29803, T34980, T37615. M37071, T032501, TS44839, AT049652 jelű OTKA pályázatok, az OMFB1548, OMMU-708 pályázatok, az FO 502/1-1 jelű német DFG pályázat és az RII3-CT-20040506078 jelű EU pályázat támogatta. Az összes számítást az ELTE 330 személyi számítógépéből és a wuppertali egyetem 1100 gépéből álló rendszeren végeztük.

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	7
1.1. A QCD két fázisdiagramja	9
2. QCD termodinamika rácson	13
2.1. A rács hatás	14
2.2. Korrelációs függvények	19
2.3. A kontinuum limesz	20
2.4. Algoritmusok	21
3. Nulla kémiai potenciál	27
3.1. A hatás megválasztása	27
3.2. $T=0$ szimulációk	29
3.2.1. Az LCP meghatározása	29
3.2.2. A skála meghatározása	33
3.3. A QCD átmenet rendje	36
3.4. Az átmeneti hőmérséklet	41
3.4.1. Királis szuszceptibilitás	43
3.4.2. Kvarkszám szuszceptibilitás	44
3.4.3. Poljakov hurok	46
3.5. Az állapotegyenlet	50
4. Véges kémiai potenciál	59
4.1. A kémiai potenciál a rácson	59
4.2. Az előjel probléma	60
4.3. Többparaméteres átsúlyozás	62
4.3.1. Az $N_f = 4$ fázisátmenet $\mu > 0$ esetén	65
4.3.2. Az $N_f = 4$ fázisgörbe meghatározása Lee-Yang zérusok segítségével	66
4.3.3. $N_f = 2 + 1$ íz használata $\mu > 0$ esetén	70
4.4. A QCD kritikus pontja	72

4.5.	A $\mu > 0$ állapotegyenlet	77
4.5.1.	Az LCP meghatározása	77
4.5.2.	A legjobb átsúlyozás vonala	80
4.5.3.	A nyomás és az energiasűrűség meghatározása	83
5.	Összefoglalás, kitekintés	89

1. fejezet

Bevezetés

A kvantum-színdinamika (QCD) az erős kölcsönhatás ma ismert legpontosabb elmélete. A QCD elemi részecskéi –ellentétben a Standard Modell által leírt többi részecskével– nem figyelhetők meg közvetlenül. A QCD Lagrange-függvényében szereplő kvarkokkal és gluonokkal a természetben csak kötött állapotok, hadronok formájában találkozunk.

A QCD talán legfontosabb tulajdonsága az aszimptotikus szabadság. Alacsony energiákon a csatolási állandó értéke nagy, azonban ez nagy energiák felé haladva csökken, nullához tart. Míg alacsony energiákon a csatolás nagy értéke miatt a részecskefizika egyik legfontosabb eszköze, a perturbációs számítás nem működik, az energiaskála növekedésével –és az aszimptotikus szabadság értelmében a csatolás csökkenésével– lehetőség nyílik szórások hatáskeresztmetszetének perturbatív számolására. A jóslatokat a kísérletek is megerősítik.

Alacsony energián (körülbelül 1 GeV alatt) a kötött állapotok és kölcsönhatásaik leírására nemperturbatív módszerekre van szükség. A ma ismert legszisztematikusabb nemperturbatív módszer a rácsatélmélet. A Lagrange-függvényben szereplő tereket egy téridő rács pontjain értelmezzük, majd a rácsállandó szisztematikus csökkentésével és a kontinuum-extrapoláció segítségével kapunk kontinuum eredményeket. Bár a rácsatélmélet már évtizedek óta létezik, a kontinuum extrapoláció elvégése csak mostanra vált lehetségessé.

Az aszimptotikus szabadság további következménye, hogy a csatolás nemcsak nagyenergiás ütközések esetén, hanem magas hőmérsékleten is csökken. Így azt várjuk, hogy végtelen hőmérsékleten (a Stefan-Boltzmann limeszben) egy kölcsönhatásmentes kvarkokból és gluonokból álló gázt kapunk a hadronikus anyag helyett. Ezek alapján azt gondoljuk, hogy a két lényegesen különböző fázis között fázisátmenet történik valamilyen T_c hőmérsékleten, melynek értékét nagyságrendileg a QCD skála (≈ 200 MeV) közelébe várjuk.

Nagy sűrűség esetén is, a magas hőmérséklethez hasonlóan azt várjuk, hogy

a csatolás csökken és aszimptotikusan nagy sűrűségeknel már nincs kölcsönhatás a kvarkok és gluonok között. Mivel rács QCD-ben a termodinamikai mennyiségeket általában a nagykanonikus állapotösszegekből származtatjuk, a sűrűséget a kémiai potenciál (μ) segítségével szabályozhatjuk. A kémiai potenciál növelésével az átmeneti hőmérséklet folyamatosan csökken. A T - μ síkon egy nemtriviális fázisdiagram rajzolódik ki.

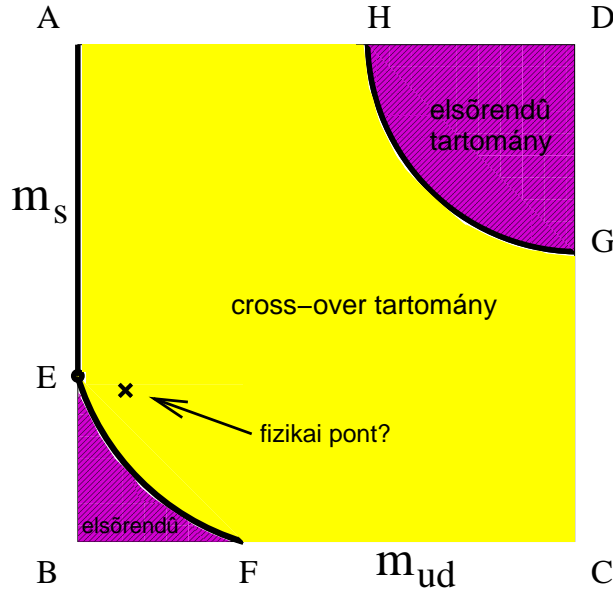
A QCD magas hőmérsékletű és sűrűségű viselkedésének vizsgálata és a fázisdiagram feltérképezése nem csak elméleti szempontból fontos. A korai világegyetemben az ősrobbanást követően körülbelül 10^{-5} másodperccel lezajlott az átmenet és kialakult a ma körülöttünk megtalálható hadronikus anyag. Az átmenet rendjének és hőmérsékletének meghatározása hozzájárul a korai világegyetem megértéséhez és kozmológiai következményekkel is járhat. Mivel a korai univerzumban a részecskék és antirészecskék száma majdnem egyenlő, az a termodinamikai rendszer nagyon jó közelítéssel $\mu = 0$ kémiai potenciálnak felel meg.

A kísérleti nehézion fizika egyik fontos célja a fázisdiagram feltérképezése. A hőmérséklet és kémiai potenciál meghatározása az ütközések során nem könnyű feladat. Minél nagyobb energiával ütköztetik a részecskéket, a $T - \mu$ síkon bejárt trajektória annál közelebb van a $\mu = 0$ tengelyhez. A korábbi alacsonyabb energiás ütközések (például a CERN SPS gyorsítóban) a nagyobb μ (körülbelül 150-200 MeV) tartományt térképezték föl, míg a jelenleg is futó nagyenergiás RHIC gyorsító kísérletei az alacsonyabb (körülbelül 40 MeV) tartományt vizsgálják. A jövőbeli LHC gyorsító nehézion fizikai programja már a $\mu = 0$ tengely mentén fogja tanulmányozni a termodinamikát. A darmstadti GSI-ben épülő FAIR gyorsító CBM kísérlete kifejezetten a nagy μ tartományt fogja vizsgálni.

A fázisdiagram nagy sűrűségű, alacsony hőmérsékletű tartománya például neutroncsillagok belsejének leírásához adhat segítséget. A fázisdiagram pontos ismerete eldönthetné azt a kérdést, hogy van-e kvarkanyag a neutroncsillagok magjában.

Jelen értekezés célja a QCD fázisátmenetének vizsgálata rácsélmélet segítségével. Első lépésben meghatározzuk az átmenet rendjét és az átmeneti hőmérsékletet nulla barionsűrűség mellett. Az eredmények azt mutatják, hogy nincs valódi fázisátmenet, csak egy analitikus crossover a hadronikus és a kvarkok/gluonok által dominált fázisok között. Ennek megfelelően, különböző mennyiségekkel definiálva különböző, de egyértelmű értékeket kapunk T_c -re. Az átmeneti hőmérsékleten túl az erősen kölcsönható anyag állapotegyenletét is meghatározzuk.

Második lépésként továbblépünk a $\mu = 0$ tengelyről a nemnulla barionsűrűségek irányába. Ez a lépés a későbbiekben részletezendő előjel probléma miatt nagyon nehéz. Míg a $\mu = 0$ átmenettel kapcsolatban már húsz éve vannak (ugyan



1.1. ábra. A QCD hipotetikus fázisdiagramja az m_s - m_{ud} síkon. A középső nagy tartományban nincs fázisátmenet, míg a sarkokban levő (lila) tartományokban elsőrendű átmenetet várunk. Az elsőrendű átmenetek határán, valamint az AE szakasz mentén másodrendű az átmenet.

nem kontinuum extrapolált) eredmények, addig a fázisdiagram többi részéről egészen a közelmúltig nem sikerült semmilyen kvantitatív eredményt elérni rácskélet segítségével. 2001-ben sikerült egy olyan eljárást kidolgoznunk, mely először tette lehetővé több fontos kérdés vizsgálatát. A módszer segítségével meghatározzuk a fázisgörbét μ kis értékeire, a görbe mentén lokalizáljuk a QCD kritikus pontját, majd a $\mu = 0$ esethez hasonlóan megadjuk az állapotegyenletet is.

1.1. A QCD két fázisdiagramja

Mielőtt az eredmények ismertetését megkezdénénk, tekintsük át, hogy milyen képet várunk a QCD fázisdiagramjáról. Az 1.1 ábrán láthatjuk a QCD egy hipotetikus fázisdiagramját az m_{ud} könnyű és az m_s ritka kvarktömegek függvényében. A valóságban a kvarktömegek fix értékek, ezeknek az ábrán mindössze egy pont felel meg. Az ábra az átmenet rendjére vonatkozó várakozásokat mutatja. A QCD egy SU(3) mértékelmélet, melynek két olyan fontos határeset van, ahol extra szimmetriák vannak. Az egyik fontos határeset a végtelen nehéz kvarkok esete (az ábra D pontja). Ez a tiszta SU(3) Yang-Mills elméletnek felel meg, melynek a mértékszimmetrián túl egy Z(3) centrum szimmetriája van. Ez a szimmetria magas hőmérsékleten spontán sérül, a hozzá tartozó rendparaméter a Poljakov

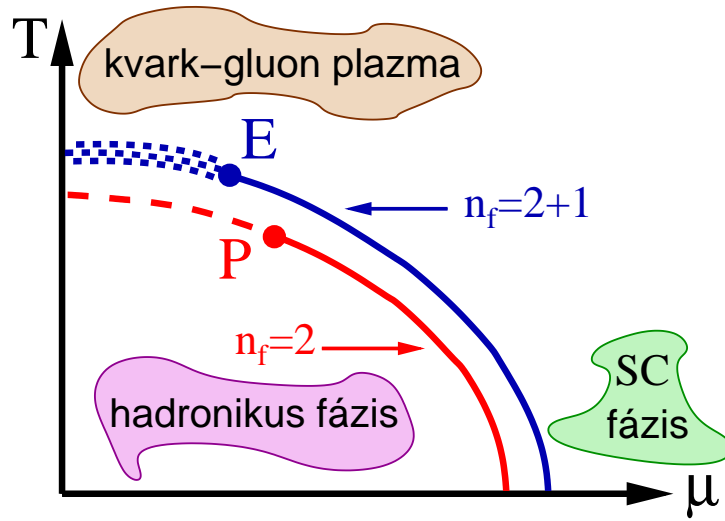
hurok. A szimmetria sérüléséhez kapcsolódó fázisátmenet a felszabadító fázisátmenet, melynek során a kvarkok bezárása megszűnik. A fázisátmenetet rács számolásokkal először $SU(2)$ mértékelméletben vizsgálták [1, 2]. Későbbi analízisek igazolták, hogy az $SU(3)$ Yang-Mills elméletben az átmenet elsőrendű és körülbelül 270 MeV hőmérsékleten történik [3–7].

A másik fontos határeset a nulla tömegű kvarkok esete (A és B pontok). Ez esetben a QCD királis szimmetriával rendelkezik. A bal- és jobbkezes kvarkok egymástól függetlenül transzformálódnak, N_f darab nulla tömegű kvark esetén (Az A pontban $N_f = 2$, a B pontban $N_f = 3$) a teljes szimmetriacsoport $U(N_f)_L \times U(N_f)_R$. Nulla hőmérsékleten a királis szimmetria spontán sérül, a megfelelő Goldstone-bozonok a pszeudoskalár mezonok ($N_f = 2$ esetben a három pion). Mivel a valóságban a kvarktömegek nem nullák, a királis szimmetria csak közelítőleg teljesül. Így a mezonok tömege nem nulla (de lényegesen alacsonyabb a többi hadron tömegénél). Magas hőmérsékleten a királis szimmetria helyreáll a királis fázisátmenet során. A rendparaméter a királis kondenzátum. A nulla kvartömegű limesz vizsgálatára még nincsenek megbízható rács eredmények. A QCD-vel megegyező szimmetriákkal rendelkező effektív modellek segítségével lehet vizsgálni az átmenetet. Az eredmények azt mutatják, hogy $N_f = 2$ esetben másodrendű $O(4)$ univerzalitási osztályú, míg $N_f = 3$ esetben elsőrendű fázisátmenet várható [8]. Közepes kvarktömegek esetén nem várunk fázisátmenetet, így rajzolódik ki az 1.1 ábrán látható összetett kép. Az egyik fontos kérdés, melyre választ keresünk, hogy a fizikai pont melyik tartományban található.

A QCD valódi fázisdiagramjának egy lehetséges változatát láthatjuk az 1.2 ábrán a $T-\mu$ síkon. Nulla hőmérsékleten és nagy kémiai potenciálon modell számolások azt mutatják, hogy elsőrendű fázisátmenet várható [9]. Két nulla tömegű kvark esetén így a $\mu = 0$ -nál tapasztalható másodrendű átmenet és a nagy μ tartománybeli elsőrendű átmenet között léteznie kell egy P trikritikus pontnak. Látni fogjuk, hogy a fizikai pont a crossover tartományban van, így ez esetben a crossover és az elsőrendű tartományok közt várunk egy E kritikus végpontot.

Nagy kémiai potenciálon különösen érdekes jelenségeket várunk. Az aszimptotikus szabadság miatt nagy sűrűségek esetén egy sűrű, majdnem kölcsönhatásmentes fermionokból álló közeg jön létre. Mivel a kvarkok között vonzó kölcsönhatás van, ezért a szupravezetéshez hasonlóan az $SU(3)$ szimmetria spontán sérülhet és kialakulhatnak Cooper-párok. Ezt a jelenséget hívjuk szín-szupravezetésnek. Ennek az érdekes jelenségkörnek a vizsgálata már túlmutat az értekezés határain.

A dolgozat további szerkezete a következő. A 2. fejezetben röviden összefoglaljuk azokat a rácskérelméleti módszereket, melyekre a későbbi fejezetek épülnek. Ezután rátérünk a nulla kémiai potenciál vizsgálatára a 3. fejezetben. Meghatározzuk a QCD átmenet rendjét, az átmeneti hőmérsékletet és az állapotegyenle-



1.2. ábra. A QCD egy lehetséges fázisdiagramja. Két nulla tömegű kvark esetén (piros görbe) a másodrendű (szaggatott) és az elsőrendű (folytonos) tartományok között található a P trikritikus pont. A valódi kvarktömegeket használva (2 könnyű és egy nehéz íz; kék görbe) a crossover (pontosított rész) és az elsőrendű (folytonos vonal) tartományokat az E kritikus végpont választja el egymástól.

tet. A 4. fejezetben következik a nemnulla kémiai potenciál vizsgálata. Az előjel probléma szemléltetése után ismertetjük a többparaméteres átsúlyozás módszerét. Ennek segítségével meghatározzuk a fázisgörbét, a kritikus pont helyét és az állapotegyenletet. Az 5. fejezetben az összefoglaláson túl áttekintjük, hogy mi várható a közeljövőben az egyes részterületeken.

2. fejezet

QCD termodinamika rácson

A következőkben röviden áttekintjük a rácsélmélet fontosabb elemeit. Teljes bevezetés helyett azokra az elemekre szorítkozunk, melyek a termodinamikai vizsgálatok szempontjából fontosak. Részletes rácsélméleti bevezetéshez javasolható a [10] referencia.

A termodinamikai mennyiségeket a nagykanonikus állapotösszegből származtathatjuk. Az állapotösszeg euklideszi térelméletben a következő funkcionálintegrállal adható meg:

$$Z = \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S_E(U, \bar{\psi}, \psi)}, \quad (2.1)$$

ahol U a mértéktér (gluonok), ψ és $\bar{\psi}$ pedig a fermion terek (kvarkok). A QCD SU(3) mértékelmélet, a fundamentális ábrázolásban levő fermionokkal. Így az U mértéktér minden téridő pontban, minden irányra egy SU(3) mátrix. A fermionokat a Fermi statisztika miatt Grassmann változók reprezentálják.

A Boltzmann faktorban szereplő S_E euklideszi hatás a mérték- és fermion tereknek a funkcionálja. A (2.1) képletben explicit módon nincs kiírva, de a hatás további paramétereiktől is függ. Ezek: a β csatolási állandó (mely a kontinuumban szokásos csatolással a $\beta = 6/g^2$ kapcsolatban áll), az m_i kvarktömegek és a μ_i kémiai potenciálok. Amennyiben több kvark-ízt szeretnénk leírni, minden egyes kvarkhoz hozzá kell rendelnünk a megfelelő ψ_i tereket, a (2.1) képlet az egyszerűség kedvéért csak egy kvarkot ír le. A természetben hat kvark van, ezek közül a három legnehezebb (c, b, t) jóval nagyobb tömegű, mint az általunk vizsgált energia tartomány, így ezeket a rács számolásokban nem szokás figyelembe venni. Alacsony energián ezek a kvarkok nem szerepelnek a kezdeti- és végállapotokban és keltődni sem tudnak a folyamatok során. A maradék három kvark közül (u, d, s) a két könnyű kvark (u, d) tömege közel azonos és sokkal kisebb az s kvark tömegénél. Ezért rácsélméleti vizsgálatokban az $m_u = m_d < m_s$ közelítéssel szoktak élni, vagyis egzakt SU(2) izospin szimmetriát feltételeznek.

A továbbiakban mi is ezt követjük, erre a közelítésre 2+1 kvark ízként fogunk hivatkozni. Ezen közelítés jogosságát támasztja alá az is, hogy az izospin sértés a hadronok szintjén (például a piontömegek felhasadása) csak körülbelül 50%-ban adódik a kvarktömegek különbözőségéből, a maradék az elektromágneses effektusoknak tulajdonítható, mivel az u és d kvarkok különböző elektromos töltésűek. Így a kvarktömegek különbözőségének pontos figyelembevétele már az elektrodinamika beépítését is megkövetelné. A 2+1 íz közelítéssel százalék pontosságú eredmények kaphatók, mely a rácstérelméletben nagyon jónak számít. A könnyű kvarkok azonosnak vett tömegét a továbbiakban m_{ud} -vel jelöljük.

Az integrálási mérték $(\mathcal{D}U\mathcal{D}\bar{\psi}\mathcal{D}\psi)$ pontos értelmezéséhez regularizációra van szükség. Ezen regularizációhoz téridő rácsot használunk. A folytonos téridő helyett egy hiperkübös Λ rácsot veszünk. A terek értékét csak ezen rács pontjain, illetve a szomszédos pontokat összekötő éleken (linkek) értelmezzük. Megmutatható, hogy a kontinuumbeli mértékinvariancia fenntartásához a mértéktereket a linkeken, míg a fermion tereket a rácspontokban kell értelmeznünk. Az $x \in \Lambda$ rácspontokból kiinduló linkeket az $(x; \mu)$ párral lehet jellemezni, ahol μ a link irányát jelzi ($\mu = 1 \dots 4$). Ezáltal az integrálási mérték a következőképpen definiálható:

$$\mathcal{D}U\mathcal{D}\bar{\psi}\mathcal{D}\psi = \prod_{x \in \Lambda, \mu=1 \dots 4} dU_{x;\mu} \prod_{x \in \Lambda} d\psi_x \prod_{x \in \Lambda} d\bar{\psi}_x \quad (2.2)$$

Szemléletesen a funkcionálintegrál ezzel a regularizációval azt jelenti, hogy minden lehetséges $\{U, \psi, \bar{\psi}\}$ konfigurációra összegezni kell az $\exp(-S_E)$ kifejezést. Ez teljesen analóg egy négydimenziós klasszikus statisztikus fizikai rendszer állapotösszegével, ahol az $\exp(-E/kT)$ Boltzmann faktorokat kell összegezni minden lehetséges konfigurációra. Az energia-funkcionál szerepét (az $1/kT$ szorzótól eltekintve) az euklideszi hatás játssza. Lényeges különbség azonban, hogy míg a klasszikus statisztikus fizikai rendszerben a hőmérséklet a Boltzmann faktorban szerepel, esetünkben a fizikai hőmérséklet a rács euklideszi idő irányú kiterjedésével fordítottan arányos. Belátható, hogy a (2.1) állapotösszeg éppen a statisztikus fizikai állapotösszeget adja, amennyiben a mértékterekre periodikus, a fermionokra antiperiodikus határfeltételt szabunk ki az euklideszi idő irányban.

2.1. A rács hatás

A regularizáció során természetesen az S_E hatást is diszkrétizálnunk kell. Ez a lépés nem egyértelmű, különböző rács hatásoknak lehet ugyanaz a kontinuum limesze. Az egyes hatásokat a kontinuum limeszhez közeli skálázásuk különbözteti meg. Ha egy A megfigyelhető mennyiség várható értékét egy véges a rácscsillapnál kiszámítjuk, akkor az eredmény nem egyezik meg a kontinuum értékkel

hanem attól a

$$\langle A \rangle_a = \langle A \rangle + \mathcal{O}(a^\eta) \quad (2.3)$$

képlet szerint eltér. Az η kitevő a hatás regularizációjától függ. Minél nagyobb az értéke, annál „jobb” a hatás, ugyanis annál nagyobb rácsállandók esetén kaphatunk a kontinuum értékhez közeli eredményt.

A legegyszerűbb diszkretizáció az, ha a kontinuum hatásban szereplő deriváltakat differencia-hányadosokkal helyettesítjük. Az ennél jobban skálázó (vagyis nagyobb η -val, vagy kisebb előfaktorral rendelkező) hatásokat hívjuk javított hatásoknak. A továbbiakban összefoglaljuk a leggyakrabban használt rács hatásokat.

Az S_E hatás általában felbontható $S_E = S_g + S_f$ alakra, ahol S_g a mértékhatás, mely csak az U mértékterektől függ, S_f pedig a fermion hatás, mely a mérték- és fermion terek függvénye.

A legegyszerűbb mértékhatás a Wilson-hatás, mely az

$$U_P(x; \mu\nu) = U_{x;\mu} U_{x+a\hat{\mu};\nu} U_{x+a\hat{\nu};\mu}^\dagger U_{x;\nu}^\dagger \quad (2.4)$$

plakettek összege, ahol $\hat{\mu}$ a μ irányú egységvektort jelöli:

$$S_{g,\text{Wilson}} = -\beta \left(\frac{1}{3} \sum_{x,\mu<\nu} \text{ReTr} U_P(x; \mu\nu) - 1 \right) \quad (2.5)$$

Ez a hatás a legegyszerűbb valós, mértékinvariáns kifejezés, mely csak a mértékterek segítségével felépíthető. Megmutatható, hogy a kontinuum limeszben ez a szokásos Yang-Mills hatásra vezet.

A hatás javítása további mértékinvariáns tagok hozzáadásával lehetséges, melyek közül a legegyszerűbb a plaketthez hasonlóan egy 2×1 -es téglalap mentén a linkek rendezett szorzata. Egy adott pontban és adott irányokra ezt a hurkot $U_{2 \times 1}(x; \mu\nu)$ -vel jelölve a következő alakú hatást kapjuk:

$$S_g = -\frac{\beta}{3} \left(c_0 \sum_{x,\mu<\nu} \text{ReTr} U_P(x; \mu\nu) + c_1 \sum_{x,\mu \neq \nu} \text{ReTr} U_{2 \times 1}(x; \mu\nu) \right) \quad (2.6)$$

Megmutatható, hogy ez a hatás fagráf szinten javítja a skálázást, ha az együtthatók teljesítik a $c_0 + 8c_1 = 1$ konzisztencia feltételt és $c_1 = -1/12$. Az így kapott javított hatást hívjuk fagráf szintű Symanzik javított hatásnak.

A fermion terek diszkretizációja lényegesen nehezebb, mint a mértéktereké. A mértékterek esetéhez hasonló naiv diszkretizáció dimenziótlanítás után a következő hatásra vezet:

$$S_{f,\text{naiv}} = \sum_x \left[am\bar{\psi}\psi + \frac{1}{2} \sum_{\mu=1\dots 4} \left(\bar{\psi}_x U_{x;\mu} \gamma_\mu \psi_{x+a\hat{\mu}} - \bar{\psi}_x U_{x-a\hat{\mu};\mu}^\dagger \gamma_\mu \psi_{x-a\hat{\mu}} \right) \right]. \quad (2.7)$$

Kiszámolva azonban a szabad esetben ($U = 1$) a propagátort, azt találjuk, hogy az az első Brillouin zónában nem egy, hanem 16 pólussal rendelkezik, vagyis ez a naiv hatás a kontinuum hatással ellentétben 16 darab azonos tömegű fermiont ír le.

A probléma kiküszöbölésére több módszer is létezik. A két legelterjedtebb a Wilson és a Kogut-Susskind féle regularizáció. Mivel a probléma abból ered, hogy a hatás csak első deriváltakat tartalmaz, a Wilson-féle megoldás lényege, hogy egy második deriváltat tartalmazó $a\bar{\psi}\partial_\mu\partial_\mu\psi$ tagot hozzáadunk a hatásához. Ez a kontinuum limeszben eltűnik, ám véges rácsállandó esetén a nemkívánatos 15 fermion tömegét megnöveli, mégpedig $1/a$ -val arányosan. Így a kontinuum limesz felé közeledve mindössze egy fermionunk marad, a többi lecsatolódik. Az új tagot tetszőleges r együtthatóval beírhatjuk, általában $r = 1$ -et szokás használni. Ekkor a hatás a

$$S_{f,\text{Wilson}} = \sum_x \left[\bar{\psi}\psi + \kappa \sum_{\mu=1\dots 4} \left(\bar{\psi}_x U_{x;\mu} (1 + \gamma_\mu) \psi_{x+a\hat{\mu}} + \bar{\psi}_x U_{x-a\hat{\mu};\mu}^\dagger (1 - \gamma_\mu) \psi_{x-a\hat{\mu}} \right) \right] \quad (2.8)$$

alakra hozható a terek megfelelő átskalázásával. Ezen hatás hátránya, hogy a nulla kvarktömeg limeszben is sérti a királis szimmetriát, mely csak a kontinuum limeszben áll helyre. Ebből az következik, hogy a kvarktömeg additív módon is renormálódik és a (2.3) képlet szerinti skálázás csupán lineáris a -ban.

A Kogut-Susskind féle, *staggered* formalizmus lényege, hogy a fermion tér spinor komponenseit szétszjtjuk egy hiperkocka csúcsaira, majd egy spin-diagonalizáció után csak egy komponenst hagyunk meg. Ezáltal a szabadsági fokok száma negyedére csökken, vagyis az így kapott hatás várhatóan négy azonos tömegű fermiont ír le. A hatás alakja:

$$S_{f,\text{staggered}} = \sum_x \left[am\bar{\chi}\chi + \frac{1}{2} \sum_{\mu=1\dots 4} \alpha_{x;\mu} \left(\bar{\chi}_x U_{x;\mu} \chi_{x+a\hat{\mu}} - \bar{\chi}_x U_{x-a\hat{\mu};\mu}^\dagger \chi_{x-a\hat{\mu}} \right) \right], \quad (2.9)$$

ahol $\alpha_{x;\mu} = (-1)^{x_1+\dots+x_{\mu-1}}$. Itt, ellentétben a naiv, illetve Wilson fermionokkal, a χ fermion térnek csak egy spin komponense van. A továbbiakban az egyszerűség kedvéért a staggered fermionokat is ψ -vel fogjuk jelölni. Ezen formalizmus nagy előnye, hogy a királis szimmetriából egy $U(1)_L \times U(1)_R$ rész megmarad, aminek következményeként nincsen additív tömegrenormálás és $\mathcal{O}(a^2)$ -es eltérések vannak a kontinuum eredményekhez képest. További előny, hogy a Dirac-indexek hiánya miatt a numerikus számítások lényegesen egyszerűbbek és gyorsabbak. A staggered fermionok fő hátránya a már említett maradék négyes degeneráció. A későbbiekben részletesebben foglalkozunk azzal, hogyan lehet a fizikailag érdekes 2+1 ízt megvalósítani staggered fermionok segítségével.

További regularizációk is lehetségesek, azonban a Nielsen-Ninomiya tétel komoly gátat szab ezeknek a lehetőségeknek [11,12]. Eszerint ha egy regularizációtól megköveteljük a lokalitást, a helyes kontinuum limeszt és azt, hogy egy fermion ízt írjon le, akkor a királis szimmetria nem tartható. A közelmúltban sikerült megalkotni a királis szimmetriának egy olyan rács-változatát, amely nem sérül az előbbi feltételek mellett sem [13,14]. Az ilyen regularizációkat királis fermionoknak hívjuk. Ez lenne a legtermészetesebb választás, azonban bonyolultságuk miatt a regularizációk numerikus vizsgálata legalább két nagyságrenddel nagyobb számítógép időt igényel, mint a Wilson vagy staggered fermionok használata. Az első lépések (algoritmus kifejlesztése, kezdeti vizsgálatok kis rácson) már megtörténtek [15–20]. A közeljövőben várható, hogy királis fermionok alkalmazásával komolyabb eredmények születnek.

A (2.8) és (2.9) fermion hatások alakjából látható, hogy mindkét esetben (és ez általánosan is igaz) bilineáris a hatás a $\bar{\psi}, \psi$ terekben:

$$S_f = \sum_{x,y} \bar{\psi}_x M_{xy}(U) \psi_y, \quad (2.10)$$

ahol az M mátrix a (2.8) és (2.9) alakokból leolvasható. Mivel a fermionokat –ahogy korábban említettük– Grassmann változókkal reprezentáljuk, a funkcionálintegrál csupán egy-egy formális Grassmann integrál minden rácspontban. A numerikus számítások során ezen integrálok kezelése nehéz, a bozonikus terekre alkalmazott módszerek nem használhatóak. Nem ismeretes olyan hatékony eljárás az állapotösszeg számolására, mely a fermion terek szintjén működne. Szerencsére a fermionikus integrálok egzaktul elvégezhetők. A Grassmann változók integrálási szabályaiból következik, hogy:

$$\int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S_f} = \det M(U), \quad (2.11)$$

Vagyis a (2.1) állapotösszeg az alábbi alakba írható:

$$Z = \int \mathcal{D}U \det M(U) e^{-S_g(U)} = \int \mathcal{D}U e^{-\{S_g(U) - \ln \det M\}}. \quad (2.12)$$

Vagyis a fermionos elméletet visszavezettük egy csupán mértéktereket tartalmazó effektív modellre, melyben a hatás: $S_{\text{eff.}} = S_g - \ln \det M$. Sajnos ez a hatás, az eredeti $S_E = S_g + S_f$ hatással ellentétben, nem lokális, a $\det M$ fermion determináns tetszőlegesen távoli linkek közötti kölcsönhatásokat is tartalmaz. Ez az oka annak, hogy a teljes QCD numerikus vizsgálata lényegesen nehezebb, mint a tiszta SU(3) mértékelméleté.

Amennyiben több különböző (vagy azonos) tömegű fermiont szeretnénk leírni, a hozzájuk tartozó ψ_i terek kiintegrálása egy-egy független determinánst

eredményez. Kiírva a kvarktömegektől való függést is:

$$Z(m_1, m_2, \dots, m_{N_f}) = \int \mathcal{D}U \det M(m_1; U) \det M(m_2; U) \dots \det M(m_{N_f}; U) e^{-S_g(U)}. \quad (2.13)$$

Wilson-fermionok esetén ez a formula közvetlenül alkalmazható 2+1 íz leírására. Staggered fermionok esetén azonban egy extra trükköt kell alkalmaznunk. Mivel egy ψ tér alkalmazása esetén is négy fermion ír le a staggered hatás, a fermion szám növelésének analógiájára a négynél kevesebb számú fermion a determináns tört hatványával írható le. A

$$Z(N_f) = \int \mathcal{D}U [\det M(U)]^{N_f/4} e^{-S_g(U)} \quad (2.14)$$

állapotösszeztől azt várjuk, hogy N_f ízt ír le a staggered formalizmusban. Azonban egy ilyen modell lokalitása kérdéses. Míg a (2.12) állapotösszeztől láttuk, hogy egy eredetileg lokális elméletből származtatható, a (2.14) esetben ez egyáltalán nem nyilvánvaló. A kérdést elméleti oldalról jelenleg is vizsgálják [21]. Valamennyi eddigi numerikus eredmény arra utal, hogy ez az úgynevezett negyedik gyök trükk (mivel egy ízhez negyedik gyököt kell vonnunk) valóban alkalmas egy fermion íz leírására.

A továbbiakban kizárólag staggered fermionokkal foglalkozunk, ugyanis az irodalomban fellelhető eredmények döntő többsége, beleértve a saját eredményeket is, ezzel a regularizációval született. Ennek két oka van. Egyrészt a már említett gyorsaság, másrészt a részlegesen megmaradó királis szimmetria, mely a királis fázisátmenet vizsgálatánál fontos lehet.

Konkrét numerikus számolásokban véges rácsokat használunk. A rács mérete általában $N_s^3 N_t$, vagyis a három térbeli kiterjedést azonosnak (N_s) választjuk, de függetlennek az euklideszi időbeli kiterjedéstől (N_t). A rendszerünk térfogata és hőmérséklete –ahogy már említettük– az alábbi kapcsolatban áll a rács kiterjedéseivel:

$$V = (N_s a)^3, \quad T = \frac{1}{N_t a}. \quad (2.15)$$

Ennek megfelelően azokat a rácsokat, ahol $N_t \geq N_s$ nulla hőmérsékletű, míg az $N_t \ll N_s$ feltételnek megfelelőeket véges hőmérsékletű rácsoknak hívjuk. Termodinamikában általában egy szűk hőmérséklet tartományt vizsgálunk (az átmeneti hőmérséklet környékét, kivétel ez alól az állapotegyenlet meghatározása mely jóval nagyobb hőmérsékletekig is történet). Így a második képlet alapján látható, hogy állandó hőmérséklet mellett, növekvő N_t egyre kisebb rácsállandóknak felel meg. Ezért a rács finomságára általában az N_t értékével szoktunk hivatkozni.

A ma tipikus N_t értékek 4, 6, 8 és 10, ezek az átmeneti hőmérséklet környékén körülbelül $a = 0.3, 0.2, 0.15$ illetve 0.12 fm rácsállandóknak felelnek meg.

A rácsállandó egy természetes $\Lambda \sim 1/a$ levágást definiál. A rácsatélmélet egyik nehézsége abból a követelményből adódik, hogy az összes leírni kívánt részecske tömege lényegesen kisebb legyen a levágásnál, ugyanakkor a tömeg inverzével arányos Compton-hullámhosszuk beférjen a véges méretű rácsba (ellenkező esetben számottevő véges méret effektusokkal kell számolnunk). Ha nagyon különböző tömegű részecskék vannak egy modellben, akkor ez komoly alsó korlátot jelent N_s értékére. A QCD-ben a nukleon és a pion tömegének viszonylag nagy aránya emiatt nagyon megnehezíti a számolásokat. Ez az egyik oka annak, hogy a legtöbb eddigi munkában a fizikainál nagyobb kvarktömegeket használtak, ez ugyanis jelentősen növeli a pion tömegét, míg a nukleon tömege alig változik. A másik ok, mely megnehezíti a fizikai kvarktömegek használatát, az algoritmusokkal kapcsolatos.

2.2. Korrelációs függvények

Egy, az U és $\psi_i, \bar{\psi}_i$ terek funkcionáljaként előálló O mennyiség várható értékét az alábbi funkcionálintegrál adja meg:

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi O[U, \bar{\psi}, \psi] e^{-S_E(U, \bar{\psi}, \psi)}. \quad (2.16)$$

A térelmélet operátoros felépítésében a téroperátorokból felépített \hat{O} operátor függvények alakja formailag megegyezik az itteni alakkal és a kapott eredmények a két formalizmusban azonosak: $\langle \hat{O} \rangle = \langle O \rangle$.

Nulla hőmérsékleten a tipikusan használt mennyiségek a terek valamilyen interpoláló operátorainak n -pont függvényei, ezen belül is főleg a kétpont függvények. Legyen \hat{O} egy ilyen interpoláló operátor. Például a pion operátor $\hat{O} = \hat{\bar{\psi}}_u \gamma_5 \hat{\psi}_d$, ahol a fermion terek indexe az u és d kvarkokat jelöli. Az \hat{O} operátor (euklideszi) időfejlődését a \hat{H} Hamilton operátor adja: $\hat{O}(t) = e^{t\hat{H}} \hat{O}(0) e^{-t\hat{H}}$. Így a kétpont függvény egy $|n\rangle$ teljes rendszer beszúrásával a következő alakba írható:

$$\langle 0 | \hat{O}(t) \hat{O}(0) | 0 \rangle = \sum_n \left| \langle 0 | \hat{O} | n \rangle \right|^2 e^{-(E_n - E_0)t}. \quad (2.17)$$

Nagy t esetén a legkisebb olyan E_n -hez tartozó tag fog dominálni, melyre az előfaktorban szereplő mátrixelem nem nulla. Tehát egy adott kvantumszám csatornában egy megfelelő kvantumszámmal rendelkező \hat{O} operátor kétpont függvényének aszimptotikus exponenciális lecsengése adja a legalacsonyabb gerjesztés

energiáját (tömegét). A ξ korrelációs hossz fordítottan arányos a tömeggel. Rácson, a rácsállandót is kiírva $\xi = 1/(ma)$ adódik, ahol ξ a rácspontok számában mért dimenziótlan korrelációs hossz. Megfelelő operátorokat használva tetszőleges hadron tömegét meghatározhatjuk a rácson.

2.3. A kontinuum limesz

A rácsérelmélet célja természetesen az, hogy a kontinuum fizikára adhassunk jóslatokat, nem pedig egy véges a rácsállandó mellett. Mivel a regularizáció éppen a véges rácsállandó bevezetésével történt, így nem tudunk közvetlenül $a = 0$ -val számolni. A kontinuumot csupán határesetként tudjuk értelmezni. Természetesen az $a \rightarrow 0$ limeszt a (2.3) összefüggéssel összhangban akarjuk elvégezni, vagyis a limesz során a megfigyelhető mennyiségeknek véges értékekhez kell konvergálniuk. Ehhez a hatás csupasz paramétereit megfelelően hangolni kell a rácsállandó függvényében. A paraméterek rácsállandó függését a renormálási csoport egyenletek adják meg.

Láttuk, hogy tetszőleges hadron interpoláló operátorának ξ korrelációs hossza a hadron tömegével fordítottan arányos. Ha a fentiek szerint a kontinuum limesz során a hadron tömegét véges értéken akarjuk tartani, miközben a rácsállandó nullához tart, ξ divergálni fog. Tehát a kontinuum limesz az analóg statisztikus fizikai rendszerben egy kritikus pontnak felel meg. A statisztikus fizikában használatos Kadanoff-Wilson féle renormálási csoport alkalmazható a kontinuum limesz leírására. A renormálási csoport transzformáció megadja, hogyan kell a hatást változtatni a rácsállandó növelése esetén ahhoz, hogy nagy távolságokon ne változzon a fizika. Sajnos a hatás alakja oly mértékben bonyolulttá válik, hogy ez a módszer a gyakorlatban nem alkalmazható ¹. Általában a kontinuum limesz során (sőt általában, amikor a rácsállandó változik) a hatás alakját nem változtatjuk és mindössze néhány (a hatásban levő paraméterek számával megegyező számú) mennyiségről követeljük meg, hogy állandó legyen az értékük. Kijelölve ezeket a mennyiségeket, a rácsállandó változtatása egy görbét definiál a csupasz paraméterek terében. Más mennyiségeket használva más görbét kapunk. Egy-egy ilyen görbét az állandó fizika vonalának (line of constant physics: LCP) hívunk. Nagyon fontos, ahogy az előbb említettük, hogy a különböző mennyiségekkel definiált LCP-k különbözőek, csupán a kontinuum limesz közelében tartanak egymáshoz. Az LCP meghatározása általában nemperturbatív módon történik. A csupasz paraméterek különböző értékeinél megmérjük a fixen

¹Jó skálázási tulajdonságokkal rendelkező hatás megalkotására alkalmas a renormálási csoport egyenletek megoldása és a hatásban megjelenő tagok számának korlátozása [22, 23]

tartani kívánt mennyiségeket, majd néhány iteráció után tudjuk meghatározni az LCP-t.

2.4. Algoritmusok

A rács térelmélet egyik fő feladata a megfigyelhető mennyiségek várható értékének numerikus meghatározása. Ehhez sokdimenziós integrálokat kell kiszámítanunk. A mai tipikus rácsméretek mellett az integrálok akár 10^9 dimenziósak is lehetnek. Nyilvánvaló, hogy az ilyen sokdimenziós konfigurációs tér szisztematikus feltérképezése lehetetlen. Az integrálokat csak Monte-Carlo módszerek segítségével tudjuk kiszámítani. E módszerek lényege, hogy véletlenszerűen választunk térkonfigurációkat és csak ezeken a konfigurációkon értékeljük ki a meghatározandó mennyiségeinket. A legegyszerűbb módszernek az tűnhet, hogy (az integrálási mérték szerint) egyenletes eloszlással generálunk konfigurációkat. Ez azonban rendkívül ineffektív, ugyanis a Boltzmann-faktorban szereplő exponenciális függvény miatt csak a lehetséges konfigurációk nagyon kis százaléka ad számottevő járulékot az integrálhoz. Egyenletes mintavétellel nagyon kicsi a valószínűsége, hogy ezeket a konfigurációkat kiválasztjuk. A ma ismeretes egyetlen hatékony módszer a fontossági mintavételezésen alapul. A konfigurációkat nem egyenletes, hanem $p \propto e^{-S_E}$ eloszlással generáljuk. Ezáltal éppen azokat a konfigurációkat állítjuk elő, melyek nagy járulékot adnak a várható értékek kiszámításakor. A QCD esetében a teljes S_E euklideszi hatás a fermionokat leíró Grassmann teret is tartalmazza. A fontossági mintavételezés a Grassmann változókra nem értelmezhető, ezért kell a fermionokat kiintegrálnunk. A fermionikus integrálok elvégzése után az állapotösszeg a (2.12) alakot veszi fel, vagyis a fontossági mintavételezés során $p(U) \propto \det M(U) e^{-S_g(U)}$ eloszlással kell konfigurációkat generálnunk. Tegyük fel, hogy van egy végtelen $\{U_i\}$ konfiguráció halmazunk, mely ezt az eloszlást követi. Ekkor könnyen látható, hogy egy O megfigyelhető mennyiség értéke a következőképpen számítható ki:

$$\langle O \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N O(U_i). \quad (2.18)$$

Konkrét numerikus számítások során természetesen nem tudjuk elvégezni a limitet az N -ben, hanem egy véges konfiguráció sokaságon határozzuk meg a mennyiségeink értékét. Az ebből adódó hibák becslésére a *jackknife* módszert használjuk [10].

A fontossági mintavételezés alkalmazhatóságának nagyon fontos feltétele, hogy $\det M(U)$ pozitív valós szám legyen tetszőleges U konfigurációra. Ellenkező eset-

ben a $\det M(U)e^{-S_g(U)}$ kifejezés (megfelelően normálva) nem értelmezhető valószínűségként. Hogy e feltétel fontosságát érzékeltessük, röviden áttekintjük az egyik legegyszerűbb algoritmust, a Metropolis algoritmust. Valamennyi ma ismert algoritmus során az U konfigurációkat egymásból származtatjuk, melyek így egy Markov láncot alkotnak. A Metropolis algoritmus két lépésből áll. Az első lépésben az aktuális U konfigurációt véletlenszerűen megváltoztatjuk, így kapunk egy U' konfigurációt. Ehhez az új konfigurációhoz természetesen más Boltzmann súly tartozik, mint az eredetihez. A második lépésben az U' konfigurációt

$$P(U' \leftarrow U) = \min \left[1, e^{-\Delta S_g} \frac{\det M(U')}{\det M(U)} \right] \quad (2.19)$$

valószínűséggel elfogadjuk, ahol $\Delta S_g = S_g(U') - S_g(U)$. Amennyiben nem fogadtuk el az új konfigurációt (ennek valószínűsége $1 - P(U' \leftarrow U)$), akkor az U konfigurációt tartjuk meg a következő lépésre is. Látható, hogy $0 \leq P(U' \leftarrow U) \leq 1$ pontosan akkor teljesül, ha $\det M$ pozitív valós.

Szerencsére ez a nemtriviális feltétel az M fermion mátrix (Dirac operátor) γ_5 hermiticitásából következik. E szerint:

$$M^\dagger = \gamma_5 M \gamma_5. \quad (2.20)$$

Ez az egyenlőség könnyen ellenőrizhető akár a kontinuumban, akár a (2.8) illetve (2.9) rács hatások esetén.

Legyen v M^\dagger -nek egy sajátvektora λ sajátértékkel. Ekkor $\lambda v = M^\dagger v = \gamma_5 M \gamma_5 v$, ahonnan $\lambda \gamma_5 v = M \gamma_5 v$ adódik, vagyis λ M -nek is sajátértéke. Ugyanaz fordítva is igaz, vagyis M -nek és M^\dagger -nek ugyanazok a sajátértékei. Ebből következik, hogy M sajátértékei vagy valósak, vagy komplex konjugált párokba rendezhetők. Ebből látható, hogy $\det M$ mindig valós. A kontinuumban és staggered fermionok esetén a tömegtelen Dirac-operátor sajátértékei tisztán képzetesek, vagyis a tömeges operátor valós sajátértékei mindig pozitívak (meggyeznek a kvarktömeggel). Ezekben az esetekben tehát $\det M \geq 0$ is teljesül és egyenlőség csak nulla kvarktömeg esetén állhat fenn. Wilson fermionok esetén előfordulhatnak negatív valós sajátértékek. Azonban ezek a kontinuum limeszhez közeledve eltűnnek. Ebben az esetben vagy két azonos tömegű fermiont szoktak használni és ekkor $(\det M)^2$ jelenik meg, ami pozitív, vagy $|\det M|$ -t írhatunk a determináns helyett egy kvark íz esetén. Mivel a kontinuum limeszben $\det M$ csak pozitív értékeket vehet fel, az abszolút érték használata nem befolyásolja a kontinuum limeszt.

Már most érdemes megemlíteni, hogy nemnulla kémiai potenciál esetén a γ_5 hermiticitás nem teljesül, így semmi nem garantálja a determináns pozitív valós létét. Az állapotösszeg mindig valós, ezért használhatjuk az integrálás során az

integrandus valós részét. A determináns valós részének előjele azonban pozitív és negatív is lehet. Ez az előjel probléma, mely rendkívüli mértékben megnehezíti a nemnulla kémiai potenciál melletti numerikus vizsgálatokat.

A korábban említett Metropolis algoritmus, bár pontosan a kívánt eloszlással generálja a konfigurációkat, nagyon nem hatékony. Ennek két oka van. Egyrészt minden lépés megkívánja a determinánsok egzakt kiszámítását, mely a rácspontok $N_s^3 N_t$ számának köbével arányos számú műveletet igényel. A másik ok, hogy az egymást követő konfigurációk nem lesznek egymástól függetlenek (sok esetben, amikor nem fogadjuk el U' -t, akkor identikusak): az autokorreláció nagyon nagy.

Több lényegesen hatékonyabb algoritmus is létezik, ezek közül most nagyon röviden a Hibrid Monte-Carlo (HMC) algoritmust ismertetjük [24–26]. Tetszőleges pozitív definit, hermitikus H mátrix determinánsát felírhatjuk bozonikus segédterekkel az alábbi módon:

$$\det H = \frac{\int \mathcal{D}\Phi^\dagger \mathcal{D}\Phi e^{-\Phi^\dagger H^{-1} \Phi}}{\int \mathcal{D}\Phi^\dagger \mathcal{D}\Phi e^{-\Phi^\dagger \Phi}}. \quad (2.21)$$

Mivel az M fermion mátrix nem hermitikus, így általában a $H = M^\dagger M$ mátrixot szokás a fenti kifejezésben használni. Ez közvetlenül alkalmas két (staggered fermionok esetében nyolc) fermion íz leírására. N_f íz leírására formálisan használhatjuk a $H = (M^\dagger M)^{N_f/2}$ (illetve $H = (M^\dagger M)^{N_f/8}$) kifejezéseket. Ez azonban további problémákat vet fel, melyekre később visszatérünk.

A két azonos tömegű ízt leíró állapotösszeg ekkor:

$$Z = C \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\Phi^\dagger \mathcal{D}\Phi e^{-S_g(U) - \Phi^\dagger (M^\dagger M)^{-1} \Phi}, \quad (2.22)$$

ahol a (2.21) kifejezés nevezőjét, mely csak egy irreleváns konstans szorzófaktor ad Z -hez $1/C$ -vel jelöltük. Vezessünk be a rács minden éléhez egy $\Pi_{x\mu}$ spurtalan anti-hermitikus mátrixot és legyen $\Pi^2/2 = \sum_{x;\mu} |\Pi_{x\mu}|^2/2$. Szorozzuk meg Z -t az $1/C' = \int \mathcal{D}\Pi \exp(-\Pi^2/2)$ konstanssal:

$$Z = C' C \int \mathcal{D}\Pi \mathcal{D}U \mathcal{D}\Phi^\dagger \mathcal{D}\Phi e^{-\Pi^2/2 - S_g(U) - \Phi^\dagger (M^\dagger M)^{-1} \Phi}. \quad (2.23)$$

Tekintsük az alábbi függvényt, mint az U és Π terek függvényét rögzített Φ^\dagger, Φ mellett:

$$\mathcal{H}(U, \Pi) = \Pi^2/2 + S_g(U) + \Phi^\dagger (M(U)^\dagger M(U))^{-1} \Phi. \quad (2.24)$$

E függvény változói minden $(x; \mu)$ linkre az $U_{x\mu}$ és $\Pi_{x\mu}$ mátrixok. Tekinthezünk ezekre úgy, mint egy klasszikus mechanikai sokrészecske rendszer általános koordinátáira ($U_{x\mu}$) és impulzusaira ($\Pi_{x\mu}$), miközben \mathcal{H} a Hamilton-függvény. Ekkor egy fiktív t idő függvényében a kanonikus egyenleteket megoldva olyan $U(t)$ és

$\Pi(t)$ trajektóriákat kapunk, melyek mentén \mathcal{H} állandó. Így az U és Π terekre megvalósítható egy speciális Metropolis lépés (egy olyan U', Π' választás), melynek során (2.23) integrandusa nem változik és ennek megfelelően az elfogadási valószínűség 1. A Φ^\dagger, Φ terek frissítése közvetlenül, úgynevezett globális hőfürdővel lehetséges. A kanonikus egyenletek megoldása természetesen numerikusan történik, így \mathcal{H} megmaradása nem teljesül egzaktul. Megmutatható, hogy az általánosan használt *leapfrog* integrálás esetén véges ε lépésközt használva $\Delta\mathcal{H} \propto \varepsilon^2$. Ezért minden $U(t), \Pi(t)$ trajektória végén el kell végeznünk a Metropolis tesztet, mert az elfogadási valószínűség egyenél kisebb lesz. A HMC algoritmus ezek alapján az alábbi lépésekből áll:

1. Rögzített U mértéktér mellett generálunk Π, Φ^\dagger és Φ konfigurációkat a (2.23) integrandusa szerinti eloszlással. Ez közvetlenül lehetséges.
2. Rögzített Φ^\dagger, Φ mellett valamilyen véges ε lépésközzel numerikusan integráljuk a kanonikus mozgásegyenleteket $t = 0$ -tól T -ig. Tipikusan $T = 1$ -et szokás használni.
3. Az új U' konfigurációt

$$P(U' \leftarrow U) = \min [1, e^{-\Delta\mathcal{H}}] \quad (2.25)$$

valószínűséggel elfogadjuk, Π' -t pedig eldobjuk, hiszen a következő frissítés során újra generáljuk.

Belátható, hogy ezen lépések ismétlése a kívánt eloszlással generál mértékkonfigurációkat. A numerikusan legtöbb számítást igénylő feladat a 2. pontban számolt trajektória minden lépésében, valamint a 3. pontban az $(M^\dagger M)^{-1} \Phi$ kifejezés kiszámítása, vagy az ezzel identikus

$$\Phi = (M^\dagger M) \chi \quad (2.26)$$

lineáris egyenletrendszer megoldása. Ez konjugált gradiens módszerrel a rácspontok számával arányos idő alatt megoldható, mivel az M ritka mátrix. A megoldáshoz szükséges iterációk száma (és így az idő) az M mátrix kondíciós számával arányos. M legkisebb abszolút értékű sajátértéke a kvarktömeg (Wilson fermionoknál ennél valamivel kisebb sajátértékek is előfordulhatnak), míg a legnagyobb sajátérték nagyjából konstans. Így a megoldáshoz szükséges iterációk száma fordítottan arányos a kvarktömeggel. Ez a másik oka annak, hogy kis kvarktömegek használata rács QCD-ben nagyon nehéz.

Korábban említettük, hogy egy íz leírásához formálisan az $(M^\dagger M)$ kifejezés tört kitevős hatványát kell használnunk. Ekkor a szokásos konjugált gradiens

eljárás nem működik $(M^\dagger M)^{-N_f/2} \Phi$ (staggered esetben $-N_f/8$ a kitevő) kiszámítására. Megmutatható, hogy az algoritmus 2. lépésében megoldható, hogy továbbra is csak egész kitevős inverziót kelljen végezni. A 3. Metropolis lépésben azonban a tört kitevő nem kerülhető el. Sokáig nem ismertünk hatékony eljárást a tört kitevő kezelésére, így a legelterjedtebb algoritmus az R algoritmus volt [27], mely egyszerűen elhagyta a 3. lépést. Ez természetesen nem egzakt, ám mivel láttuk, hogy $\Delta\mathcal{H} \propto \varepsilon^2$, így elegendően kis lépésközt használva a 2. lépés során nem követünk el nagy hibát a 3. lépés mellőzésével. Természetesen minden R algoritmust használó analízisnek tartalmaznia kellene egy $\varepsilon \rightarrow 0$ limeszt, ezt azonban tipikusan nem szokták elvégezni.

A közelmúltban sikerült kifejleszteni a racionális Hibrid Monte-Carlo (RHMC) módszert, melyben a tört kitevőjű hatványokat racionális törtfüggvényekkel közelítik [28]. A racionális törtfüggvények jó tulajdonságainak köszönhetően 10-15 rend használatával gépi pontossáig megközelíthető a törtkitevős inverzió egzakt eredménye. Ezzel a módszerrel a HMC algoritmus mindhárom lépése végrehajtható tetszőleges N_f esetén. Meglepő módon azt tapasztaljuk, hogy az egzakt RHMC algoritmus lényegesen gyorsabb a nem egzakt R algoritmusnál.

3. fejezet

Nulla kémiai potenciál

Az eredmények ismertetését a $\mu = 0$ esettel kezdjük. Numerikus rács számítások segítségével meghatározzuk a fázisátmenet rendjét, az átmenet abszolút hőmérsékletét és az állapotegyenletet az átmenet környékén és magasabb hőmérsékleteken.

A termodinamikai vizsgálatok mindig két fő lépésből állnak. Az átmenet vizsgálata szempontjából fontos mennyiségeket természetesen magas hőmérsékleten, $N_s \gg N_t$ rácson határozzuk meg. Az egyik lépés tehát nyilvánvalóan a $T > 0$ szimulációk.

Ahhoz azonban, hogy tudjuk, hogy hogyan kell a hatás paramétereit megválasztanunk, illetve fizikai értéket (MeV-ben) tudjunk adni a hőmérsékleteknek, néhány meghatározott (a paraméterekkel megegyező számú) mennyiség értékét össze kell vetnünk a kísérletileg ismert értékkel. Úgy kell a paramétereket behangolnunk, hogy ez az összevetés egyezést mutasson. Mivel jelenleg kizárólag nulla hőmérsékletű kísérleti eredmények ismeretesek megfelelő pontossággal –ilyenek például a hadronok tömegei– így ezt a lépést csak $T = 0$ szimulációkkal tudjuk megtenni. Mivel ezen lépés során határozzuk meg a hatás paramétereit, melyeket aztán a $T > 0$ futtatásoknál használunk, célszerű az analízist a $T = 0$ szimulációkkal kezdeni, majd ezután térni át a $T > 0$ lépésre.

3.1. A hatás megválasztása

A 2. fejezetben láttuk, hogy a kontinuum extrapoláció szempontjából nagyon fontos a rács hatás helyes megválasztása. Javított hatást használva lehetséges, hogy elég nagyobb rácsállandókat használunk, mint javítatlan hatás esetében. Másrészt viszont a javított hatásoknak sokszor nagyon nagy a számításigényük. Célszerű olyan javított hatást választani, mely nem növeli lényegesen a szükséges gépidőt, de javítja a kontinuum extrapoláció viselkedését. A mértékhatások közül

a (2.6) fagráf szintű Symanzik hatás megfelel ezen feltételeknek, ezért a $\mu = 0$ vizsgálatok során végig ezt használtuk.

A fermion szektorban a staggered fermionok mellett döntöttünk. A döntés legfontosabb okai a gyorsaság, illetve a királis szimmetria részleges megmaradása. Említettük, hogy a staggered fermionok négy azonos tömegű fermion ízt írnak le szabad esetben. Kölcsönható esetben a négy fermion tömege csak kontinuum limeszben azonos, véges rácsállandó mellett sérül az $SU(4)$ íz szimmetria: a 15 megfelelő pszeudoskalár mezon tömege különböző. Ez az íz szimmetria sértés olyan nagyságrendű, hogy a termodinamikában használatos rácsállandók mellett a második legkönnyebb pszeudoskalár is háromszor-négyszer nehezebb, mint a legkönnyebb. Ez a tulajdonság természetesen a 2+1 íz leírásához szükséges negyedik gyök trükk alkalmazása után is megmarad. A bevezetőben láttuk, hogy a QCD átmenet rendje erősen függ az ízek számától és a kvarkok tömegeitől, így fontos lenne, hogy az elérhető rácsállandók mellett minél kisebb legyen az íz szimmetria sértése.

Az irodalomban ismeretes leghatékonyabb megoldás a mértékterek simítása (*smearing*). Ennek során bevezetjük az alábbi simított linkeket:

$$V_{x;\mu} = P_{SU(3)} \left[U_{x;\mu} + \rho \sum_{\nu \neq \mu} U_{x;\nu} U_{x+a\hat{\nu};\mu} U_{x+a\hat{\mu};\nu}^\dagger \right], \quad (3.1)$$

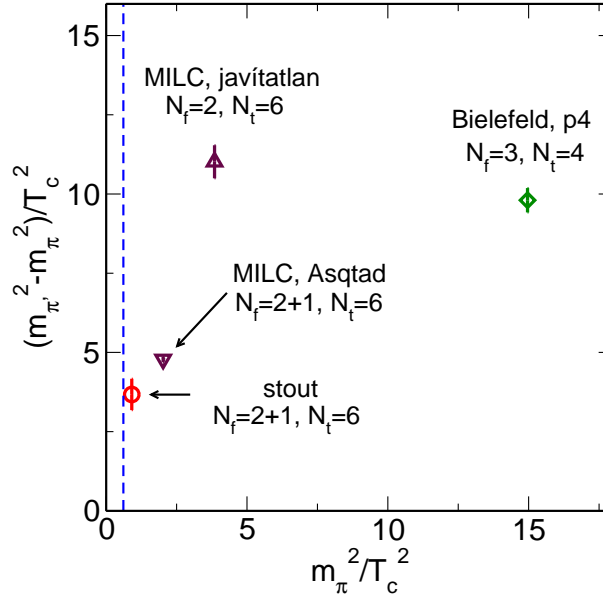
ahol $P_{SU(3)}$ valamilyen projekciót jelöl az $SU(3)$ csoportra, ρ pedig konstans, a simítás paramétere. Általános esetben megengedhetjük, hogy ρ a μ és ν függvénye legyen, most azonban ezzel nem foglalkozunk. Az eljárás háromdimenziós rácson az alábbi módon szemléltethető:

$$V = P \left[\rightarrow + \rho \left(\begin{array}{c} \nearrow + \searrow + \nwarrow + \swarrow \end{array} \right) \right]. \quad (3.2)$$

Az eredeti linkhez hozzáadjuk az úgynevezett kapcsokat (a tűzőgép kapcsához való hasonlatosság miatt nevezzük így őket).

Amennyiben a fermion hatásban (és csak ott!) az eredeti linkek helyett az így definiált V linkeket használjuk, bizonyíthatóan csökken az íz szimmetria sértés. Komoly probléma azonban, hogy a P projekció nem analitikus és ezt a szimuláció során használt algoritmusok nem tudják kezelni¹. Az eljárás kis módosításával analitikussá tehető a simítás [29]. Ezt a módszert nevezzük *stout* simításnak. A részleteket itt nem ismertetjük, azok a referenciában megtalálhatók. A simítás

¹Léteznek olyan algoritmusok, melyek tudják kezelni a nem analitikus projekciót, ezek azonban sokkal kevésbé hatékonyak, mint az RHMC algoritmus.



3.1. ábra. Az íz szimmetria sértése a piontömeg négyzetének függvényében az alábbi rács hatások esetén: MILC kollaboráció javítatlan hatás [30, 31], MILC kollaboráció ASQTAD javított hatás [32], Bielefeld csoport p4 javított hatás [33] és az általunk használt stout javított hatás. A szimmetriasértés mértékét a két legkönnyebb pion tömegnégyzetének különbségeként definiáltuk. Minden mennyiséget $T_c = 173$ MeV négyzetével normáltunk [34]. A függőleges kék vonal a fizikai piontömegnek felel meg.

hatékonysága tovább növelhető, ha azt egymás után többször alkalmazzuk, vagyis a már simított V tereket helyettesítjük újra és újra a (3.1) képlet jobb oldalába.

Az általunk választott fermion hatás a (2.9) staggered hatás kétszer simított stout linkekkel és $\rho = 0.15$ választással. Valamennyi $\mu = 0$ vizsgálatunkhoz ezt használtuk. A 3.1 ábra mutatja az íz szimmetria sértését a fenti választás, valamint néhány más, az irodalomban használt hatás esetén. Látható, hogy a stout hatás lényegesen kevésbé sérti az íz szimmetriát, mint más hatások.

3.2. T=0 szimulációk

3.2.1. Az LCP meghatározása

A termodinamikai vizsgálatok során általában több különböző hőmérséklet mellett számoljuk ki a mérhető mennyiségek várható értékét. A hőmérséklet, mint láttuk, a rács időirányú kiterjedésével fordítottan arányos: $T = 1/(N_t a)$. A hőmérséklet változtatására így két lehetőség adódik, vagy a rácspontok számát, vagy a rácállandót kell változtatni. Az előbbi megoldás ritkán alkalmazható, mi-

vel csak diszkrét lépésekben tudjuk N_t -t változtatni, így általában a rácsállandó változtatásával szabályozzuk a hőmérsékletet. Ez azt is jelenti, hogy a 2. fejezetben leírtak szerint a rácsállandó változtatásakor a hatás paramétereit megfelelően hangolnunk kell, hogy az állandó fizika vonalán (LCP) maradjunk.

Az LCP meghatározását két lépésben végeztük. Az első lépésben egy közelítő LCP-t határoztunk meg, melynek mentén a kiválasztott fizikai mennyiségek 5-10% pontossággal megfelelnek a fizikai értékeknek [35]. Ezután ezt az LCP-t finomítottuk [36].

Mivel a hatásban három paraméter van (a β csatolás és a két kvarktömeg), három mennyiséget kell választanunk. Ezek dimenziós mennyiségek, míg minden, amit a rácson számolunk, dimenziótlan. Ezért az általánosság megszorítása nélkül feltehetjük, hogy a három mennyiségből egy a rácsállandó meghatározására szolgál, míg két független dimenziótlan hányados az LCP-t definiálja. Természetesen olyan mennyiségeket érdemes választani, melyeknek pontosan ismerjük a kísérleti értékét és melyeket a rácson is egyszerű meghatározni. Mivel a királis perturbációs számítás szerint a pszeudoskalár mezonok tömegei (m_{PS}) egyértelmű kapcsolatban állnak az őket felépítő kvarkok tömegeivel ($m_{PS}^2 \propto m_q$), a kvarktömegek hangolására érdemes e mezontömegeket használni. 2+1 íz esetében ez a pionok m_π és a kaonok m_K tömegét jelenti. Harmadik mennyiségnek, a skála beállításához pedig érdemes olyat választani, melynek kicsi a tömegfüggése.

Korábbi munkákban a skála beállításához a statikus kvark-antikvark potenciált használták. Ennek egyik oka, hogy tiszta mértékelméletben is alkalmazható. A statikus kvark potenciál a rácson az úgynevezett Wilson-hurkok segítségével határozható meg. Egy $R \times T$ méretű $W_{x;\mu}(R, T)$ Wilson-hurok a plaketthez hasonló mennyiség, csak egy $\mu = 1 \dots 3$ térbeli iránnyal megadott $R \times T$ méretű téglalap mentén szorozzuk össze a linkeket (a második irány mindig az idő irány). Ezekből definiálhatjuk a Wilson-hurkok átlagát:

$$W(R, T) = \text{ReTr} \sum_{x;\mu=1\dots 3} W_{x;\mu}(R, T) \quad (3.3)$$

Megmutatható, hogy két végtelen tömegű, egymástól R távolságra levő kvarkból álló rendszer szabadenergiája (nulla hőmérsékleten ez egyszerűen egy $V(R)$ potenciál):

$$V(R) = - \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \ln W(R, T). \quad (3.4)$$

A potenciálnak általában két karakterisztikus mennyiségét szokás használni. Az egyik a σ húrfeszültség, melynek definíciója $\sigma = \lim_{R \rightarrow \infty} dV(R)/dR$. Míg σ a tiszta mértékelméletben, –ahol a potenciál lineáris nagy R -re– jól használható mennyiség, addig QCD-ben a párkeltés lehetősége miatt a potenciál nem lesz

lineáris nagy távolságokra: a húr elszakad. Ennek ellenére nem egy esetben használják még ma is σ -t a skála beállítására.

A másik származtatott mennyiség az úgynevezett Sommer paraméter, r_0 , melynek implicit definíciója [37]:

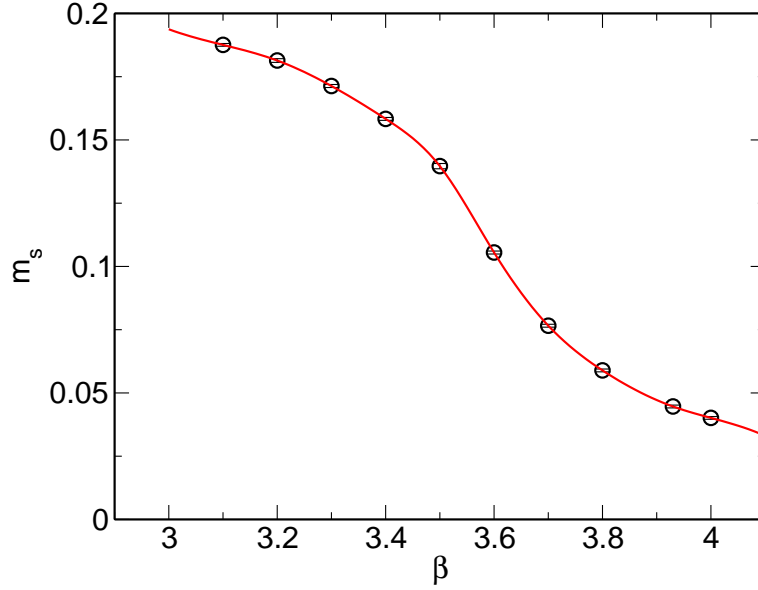
$$R^2 \frac{dV(R)}{dR} \Big|_{R=r_0} = 1.65. \quad (3.5)$$

Mindkét mennyiségnek nagy hátránya, hogy közvetlenül nem mérhetőek, értékük csak becsülhető, például nehéz kvarkokat tartalmazó mezonok spektroszkópiájából. A húr feszültség értéke $\sqrt{\sigma} \approx 440$ MeV, míg r_0 legpontosabb értéke paradox módon rácstérelméleti számolásokból ismeretes (ahol természetesen más módon volt a skála beállítva) [38, 39]: $r_0 = 0.469(7)$ fm.

Természetesen érdekesebb olyan mennyiséget választani, melynek kísérleti értékét pontosan ismerjük. Nyilvánvaló választásnak tűnhet a nukleontömeg, ennek értékét azonban a rácson nehéz pontosan meghatározni a nagy érték, illetve véges méret effektusok miatt. Gyakran használt mennyiség még a ρ vektormezon tömege. A fizikai kvarktömegeknél azonban a nagy szélessége miatt kevésbé jól használható, mivel már nem a kötött állapot a legalsó az adott kvantumszám csatornában.

Az általunk választott harmadik mennyiség a kaon leptonikus bomlási állandója $f_K = 159.8$ MeV, melynek ez a kísérleti értéke 1% hibával ismert és a rácson is nagy pontossággal meghatározható. Az m_π, m_K, f_K választással röviden illusztráljuk a korábban leírtakat. A rácson tetszőleges β , am_{ud} és am_s dimenziótlan paraméter értékek mellett meghatározhatjuk az am_π , am_K és af_K dimenziótlan mennyiségeket. Rögzített β mellett állítsuk be am_{ud} és am_s értékét úgy, hogy az $(am_\pi)/(af_K)$ és $(am_K)/(af_K)$ arányok megegyezzenek a fizikai m_π/f_K és m_K/f_K értékekkel. Így kapunk egy $am_{ud}(\beta)$ és egy $am_s(\beta)$ függvényt. Ezeket hívjuk LCP-nek. A rácsállandót a harmadik mennyiség definiálja: $a = (af_K)/(159.8 \text{ MeV})$.

Korábban már említettük, hogy az LCP függ a definíciójához használt mennyiségektől, s csupán a kontinuum limeszhez közel (mely $\beta \rightarrow \infty$ -nek felel meg) válnak egyé a különböző LCP-k. Ennek ellenére az LCP meghatározás első lépésében más mennyiségeket használtunk, f_K helyett a vektormezon tömegét választottuk. Ezzel ugyanis lehetőség nyílt arra, hogy nagy kvarktömegek mellett határozzunk meg egy közelítő LCP-t. Mint láttuk, a szimulációk nagyon érzékenyek a kvarktömegekre, ezért ez a módszer lényegesen gyorsabb, mint a kicsi, fizikai tömegek használata. A királis perturbációszámítás szerint három azonos, a ritka kvarkkal megegyező tömegű kvark íz esetén a pszeudoskalár mezon tömege (m_{PS}) és a vektormezon tömege (m_V) az alábbi kapcsolatban áll a



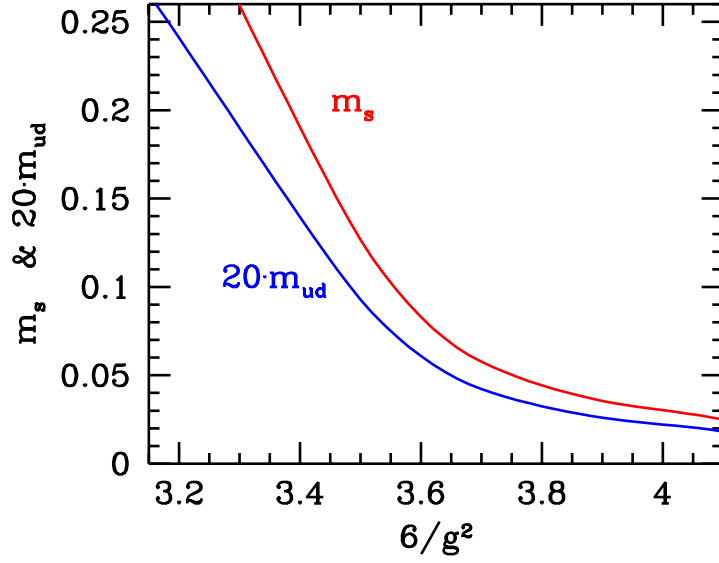
3.2. ábra. Az állandó fizika vonalának első közelítése $N_f = 3$ íz szimulációk segítségével. A könnyű kvarkok tömege $m_{ud} = m_s/25$.

fizikai tömegeknél definiált pion, kaon és Φ mezon tömegekkel:

$$m_{PS}^2/m_V^2|_{m_{ud}=m_s} = (2m_K^2 - m_\pi^2)/m_\phi^2. \quad (3.6)$$

Ezen képlet alapján $N_f = 3$ íz szimulációk alapján be tudjuk állítani a ritka kvark tömegét. Egyszerűen meg kell keresnünk minden β -nál azt a pontot, ahol ez az egyenlőség a meghatározott m_{PS} , m_V értékekre teljesül. Ezzel megadtuk az $am_s(\beta)$ függvényt. A pszeudoskalár mezon tömegek és a kvarktömegek korábban említett összefüggéséből a fizikai mezon tömegek beírásával könnyen megkaphatjuk az m_s és m_{ud} kvarktömegek arányát [40]: $m_s/m_{ud} = 25$. Így tetszőleges β -ra meghatározhatunk egy közelítő LCP-t úgy, hogy csak a ritka kvark tömegénél kell 3 íz szimulációkat végeznünk. A futtatásokhoz végig $16^3 \cdot 32$ méretű rácsokat használtunk, a β -t 3.1 és 4.0 között változtattuk. Az eredményt a 3.2 ábrán láthatjuk.

Az LCP meghatározásának második lépésében ezen LCP mentén öt pontban meghatároztuk am_π , am_K és af_K értékét. Mivel az LCP-nek megfelelő u, d tömegek használata $T = 0$ rácson túl sok számítógépidőt igényel, ehelyett ezeknek 3, 5, 7 és 9-szeresét használtuk, majd királis perturbációs számítás segítségével extrapoláltunk a fizikai pontba. Mivel nulla hőmérsékleten ismertek az extrapolációhoz szükséges függvényalakok, megbízható eredményt kaphatunk. Az adatok azt mutatták, hogy a komplikált királis perturbációs számításból jövő formulák helyett azokkal konzisztens értékeket kapunk, ha m_π^2 , m_K^2 és f_K értékét a megfelelő



3.3. ábra. Az állandó fizika vonala m_π , m_K és f_K használata esetén.

mezont alkotó kvarktömegek összegének másodfokú polinomjával illesztjük. Mivel a használt LCP csak közelítően helyes és nem f_K felhasználásával készült, így a kapott tömegarányok eltérnek a fizikai értékektől. Következő lépésben a *partial quenching* módszert alkalmaztuk több különböző tömegre. Ennek lényege, hogy a kvarktömegek kis változtatásához nem generálunk új konfigurációkat (mely a számítógépidő nagy részéért felelős), hanem csak a korrelációs függvényekhez használt operátorokba írjuk be a módosított tömeget. A tapasztalatok azt mutatják, hogy ezzel a módszerrel nagyon pontosan megkaphatjuk a hadron spektrumot, ha a kvarktömegek csak 10-20%-ot változnak. Mivel az m_{ud} tömeg értékét királis extrapolációval értük el, itt nem jelent problémát más tömeghez extrapolálni. Az m_s értékét a közelítő LCP által adott pontokhoz képest $\pm 20\%$ -kal változtattuk. Az így kapott pontokból interpolációval már nagy pontossággal meg lehetett határozni az m_π , m_K , f_K által definiált LCP-t. Ezt a finomító analízist 5 pontban, $\beta = 3.3, 3.45, 3.55, 3.67$ és 3.75 -nél végeztük el. Az így kapott LCP látható a 3.3 ábrán. Láthatjuk, hogy főleg durva rácsokon, azaz kis β -nál jelentős eltérés van a két LCP között. Ez elsősorban abból adódik, hogy más mennyiséget használtunk a rácsállandó beállítására a két esetben.

3.2.2. A skála meghatározása

A rácsállandó még pontosabb meghatározásához a második LCP mentén végeztünk új szimulációkat. A könnyű kvarkokra ismét a fizikainál nagyobb tömegeket használtunk és innen extrapoláltunk. A futtatási pontok a 3.1 táblázatban talál-

β	am_s	am_{ud}	rácsméret
3.33	0.23847	0.02621	$12^3 \cdot 24$
		0.04368	$12^3 \cdot 24$
		0.06115	$12^3 \cdot 24$
		0.07862	$12^3 \cdot 24$
3.45	0.15730	0.01729	$16^3 \cdot 32$
		0.02881	$12^3 \cdot 28$
		0.04033	$12^3 \cdot 28$
		0.05186	$12^3 \cdot 28$
3.55	0.10234	0.01312	$16^3 \cdot 32$
		0.01874	$16^3 \cdot 32$
		0.02624	$12^3 \cdot 28$
		0.03374	$12^3 \cdot 28$
3.67	0.06331	0.00928	$24^3 \cdot 32$
		0.01391	$16^3 \cdot 32$
		0.01739	$16^3 \cdot 32$
		0.02203	$14^3 \cdot 32$
3.75	0.05025	0.00736	$24^3 \cdot 32$
		0.01104	$24^3 \cdot 32$
		0.01473	$16^3 \cdot 32$
		0.01841	$16^3 \cdot 32$

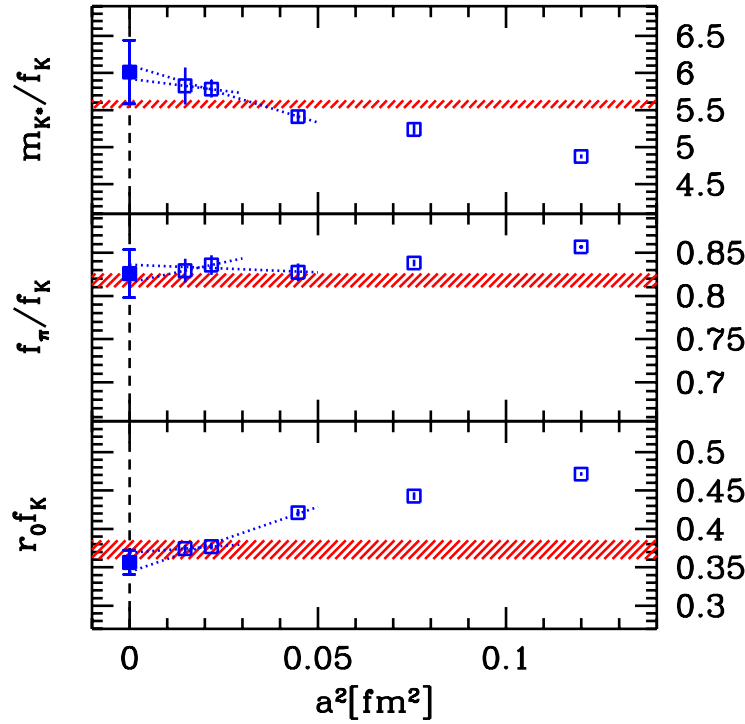
3.1. táblázat. A $T = 0$ szimulációkhoz használt rács paraméterek és rácsméretek.

β	rácsállandó [fm]
3.33	0.347(6)
3.45	0.276(5)
3.55	0.213(4)
3.67	0.150(3)
3.75	0.122(2)

3.2. táblázat. A rácsállandó f_K segítségével meghatározott értéke az LCP mentén.

hatók. A generált konfigurációk száma 700 és 3000 között volt minden pontban. A véges méret effektusok minimalizálásának céljából a rácsok méretét mindig úgy választottuk meg, hogy $N_s a m_\pi \geq 4$ teljesüljön. A királis extrapolációt a korábban említett módon, a kvarktömeg másodfokú polinomjával végeztük. Az m_π/f_K és m_K/f_K arányok hibán belül megegyeznek a kísérleti értékekkel. Az f_K segítségével meghatározott rácsállandók a 3.2 táblázatban láthatók. Ezek után közbülső β értékekre mind az LCP-t mind a skálát interpolációval határozhatjuk meg. Főleg a skála esetén fontos a pontos interpoláció (a csupasz kvarktömegek beállításánál százaléknyi eltérés nem okoz megfigyelhető különbséget a termodinamikai mennyiségekben), itt az $\ln a(\beta)$ függvényt kvadratikusán interpoláltuk. Összességében megállapíthatjuk, hogy mind az LCP-t, mind a skálát sikerült körülbelül 2% pontossággal meghatározni. Ennél nagyobb pontosságra nem is érdemes törekednünk, ugyanis a már korábban említett izospin szimmetria sértés és az elektromágneses effektusok ebbe a nagyságrendbe esnek.

Az LCP és a skála meghatározásához három mennyiséget használtunk. E lépések után már valamennyi további megfigyelhető mennyiség a rács QCD jóslata. Érdekes megvizsgálni, hogy néhány további könnyen meghatározható mennyiség mennyire mutat jó egyezést a kísérleti értékkel a kontinuum limeszben. Amennyiben már elegendően kicsik a rácsállandók és a QCD valóban az erős kölcsönhatás helyes elmélete, tökéletes egyezést kell látnunk. A 3.4 ábra mutatja a K^* mezon m_{K^*} tömegét, a pion f_π bomlási állandóját, és az r_0 Sommer paraméter értékét (valamennyit f_K -val dimenziótlanítva) az öt különböző rácsállandó mellett. A kontinuum extrapolációt elvégeztük a két- illetve három legfinomabb rácson mért értékekből is. Ezek különbsége megadja a kontinuum extrapoláció szisztematikus hibáját. Az ábrán láthatjuk a kontinuum extrapolált értékeket is. Az m_{K^*} és f_π esetében a kísérleti, míg az r_0 esetében a MILC kollaboráció által mért értékkel [38] tudjuk összehasonlítani az eredményt. Mindhárom esetben tökéletes egyezést látunk. Ez egyben azt is mutatja, hogy a legkisebb rácsállandóink már a skálázó tartományban vannak. Ha más mennyiségekből határoztuk volna meg



3.4. ábra. a K^* mezon tömege, a pion bomlási állandója és az r_0 Sommer paraméter (fentről lefelé). Mindhárom mennyiséget f_K értékével dimenziótlanítottuk. Az öt ráczállandó mellett meghatározott értékeken kívül láthatjuk még a kontinuum extrapolált értékeket is. A kontinuum extrapolációt két- illetve három ráczállandó használatával is elvégeztük (szaggatott vonalak). A piros sávok a felső két esetben a kísérleti, $r_0 f_K$ esetében rácseredményt mutatnak.

az LCP-t, ugyanazt a kontinuum limeszt kapnánk.

3.3. A QCD átmenet rendje

Az LCP és a skála meghatározása után áttérünk a $T > 0$ szimulációkra. Első feladatunk az átmenet megkeresése és rendjének (elsőrendű, másodrendű, vagy analitikus crossover) meghatározása [41].

Mivel a korai világegyetem tágulása során lezajlott ez az átmenet, így rendjének meghatározása nem csak elvi szempontból fontos, hanem kozmológiai következményekkel is járhat [42]. Erős, elsőrendű fázisátmenet esetén a gyors hűlés során a kvark-gluon plazma túlhűlhet, még mielőtt hadronanyagból álló buborékok jelennek meg benne. Ezek a buborékok aztán gyorsan növekszenek, egymással ütköznek. Az ütközések során gravitációs hullámok keletkezhetnek [43]. A bubo-

rékok határa mentén nagy barionsűrűségű anyagrészek maradhatnak, melyek a sötét anyaghoz adhatnak járulékot. A nukleoszintézis menetét is befolyásolhatja egy erős elsőrendű fázisátmenet [44]. Amennyiben a fázisátmenet gyenge, vagy akár analitikus, ezek a jelenségek kizárhatók.

Az átmenet rendjének meghatározására korábban modell számolásokat végeztek, valamint rács QCD segítségével is történtek próbálkozások tiszta mértékelméletben, illetve fermionok figyelembevételével [3–8, 45–50]. E munkák egyike sem tudott végleges választ adni a QCD átmenet rendjére. Modell számolások általában csak nulla, vagy végtelen kvarktömegek esetén használhatók. Korábbi rács analízisek a fizikainál nagyobb kvarktömegeket használtak, és nem végeztek kontinuum extrapolációt. Ezen eredmények egyik fontos tapasztalata, hogy amennyiben megbízható választ akarunk adni a fázisátmenet rendjére, két fontos dologra kell ügyelnünk.

(1) **Fizikai kvarktömegek használata.** A fázisátmenet rendjére vonatkozó várakozások ismertetésekor láttuk, hogy a kvarktömegektől jelentősen függ az átmenet rendje. Három azonos tömegű kvark íz esetében nulla és végtelen kvarktömegeknél is elsőrendű az átmenet, míg közbülső értékekre valószínűleg crossover. Mivel az átmenethez közeli hőmérsékleteken a királis perturbációszámítás nem alkalmazható, így nem tudunk magasabb tömegű eredményekből megbízhatóan extrapolálni a fizikai kvarktömegekre. Különösen igaz ez akkor, ha az extrapoláció során átlépjük a crossover és elsőrendű tartományok határát. Közvetlenül a fizikai kvarktömegeknél (az LCP mentén) kell a $T > 0$ szimulációkat végeznünk. Szerencsére a mai számítógépes erőforrások és algoritmusok ezt lehetővé teszik.

(2) **A kontinuum limesz elvégzése.** Véges rácsállandó esetén a diszkretizációs hibák jelentősen befolyásolhatják az eredményt. Ezek a hibák a kontinuum limeszben eltűnnek. A következő példa azt szemlélteti, hogy az átmenet rendjét illetően mennyire fontos a diszkretizációs hibák eltüntetése. Három azonos tömegű kvark íz esetén nulla kvarktömegnél elsőrendű az átmenet. A kvarktömegeket (és ezáltal a pszeudoskalár mezonok tömegét) növelve az átmenet gyengül, majd egy $m_{PS;c}$ kritikus pszeudoskalár tömeghez tartozó értéknél másodrendűvé válik. Magasabb kvarktömegekre nincs fázisátmenet. Az $m_{PS;c}$ értékét meghatározták $N_t = 4$ rácson két, különböző diszkretizációs hibákkal rendelkező rács hatás esetén. Javítatlan staggered hatást használva $m_{PS;c} \approx 300$ MeV [51], míg p4 javított hatást használva $m_{PS;c} \approx 70$ MeV [52]. A két érték azért is különösen érdekes, mivel a fizikai piontömeg értéke a kettő közé esik. Tehát 140 MeV pszeudoskalár tömegnél javítatlan hatást használva $N_t = 4$ rácson elsőrendű, míg p4 hatással ugyanezen rácson crossover viselkedést tapasztalunk. Az átmenet tényleges rendjét ebben a három íz QCD esetben csak a diszkretizációs hibák eltüntetésével, vagyis a kontinuum limeszszel lehet megmondani.

Elsőrendű fázisátmenet esetén a termodinamikai potenciál első deriváltja nem folytonos. Másodrendű átmenetről beszélünk, ha az első derivált folytonos, és csak a második derivált szinguláris. Analitikus crossover során a termodinamikai potenciál analitikus függvénye az állapotjelzőknek, így nincs a deriváltakban szingularitás.

Véges rácson a Z állapotösszeg egy pozitív integrandus véges dimenziós integrálja. Így $\ln Z$ deriváltjai folytonosak, nincs szingularitás. Valódi fázisátmenet csak végtelen térfogaton lehetséges. Mivel végtelen térfogatot nem tudunk rácson numerikusan vizsgálni, az átmenet rendjére véges méret skálázás segítségével következtethetünk. Első- és másodrendű fázisátalakulások során a termodinamikai mennyiségek jellegzetes térfogatfüggéssel rendelkeznek. Crossover esetén elegendően nagy térfogatosakat használva nincs térfogatfüggés.

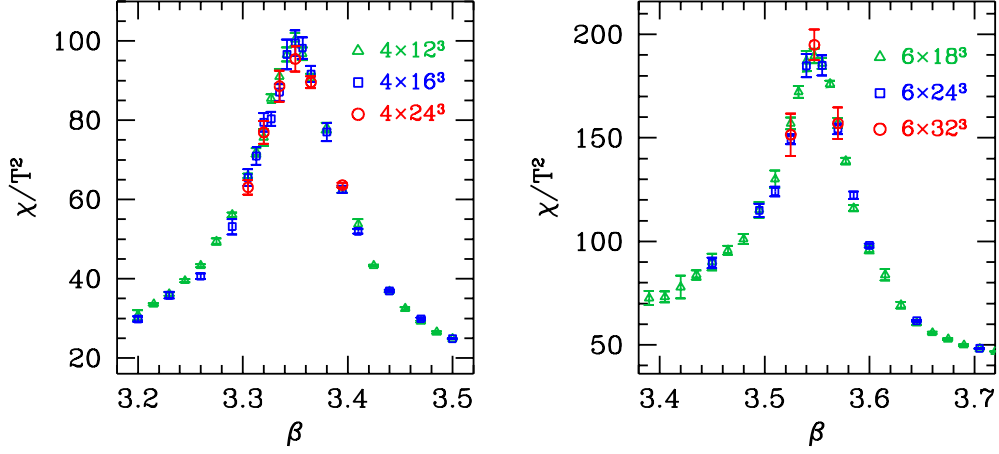
A következőkben a királis szuszeptibilitást vizsgáljuk, melynek definíciója:

$$\chi_{\bar{\psi}\psi} = \frac{T}{V} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial m_{ud}^2}. \quad (3.7)$$

Rögzített N_t mellett a β csatolást változtatjuk úgy, hogy közben végig az LCP-n maradunk. A 3.2 táblázat szerint β növelése csökkenti a rácsállandót, így a fix N_t miatt nő a hőmérséklet. Tehát β változtatásával tudjuk a hőmérsékletet hangolni, és megkeresni az átmeneti pontot: a $\chi_{\bar{\psi}\psi}(\beta)$ függvényben egy csúcsot várunk.

Elsőrendű fázisátmenet esetén a véges méret skálázás a geometriai dimenzióval kapcsolatos, a szuszeptibilitási csúcs magassága V -vel arányos, szélessége pedig $1/V$ -vel. Másodrendű átmenetnél a csúcs magassága végtelenhez tart, szélessége pedig nullához a térfogat növelésével. Mindkettő a térfogat meghatározott hatványával arányos, melyet a kritikus exponensek határoznak meg. Amennyiben az átmenet analitikus crossover, a szuszeptibilitás elég nagy V esetén már független a térfogattól.

A 3.5 ábrán láthatjuk a szuszeptibilitási csúcsokat $N_t = 4$ és $N_t = 6$ -os rácson több térfogatra. Egy adott hőmérséklet tartományban a fizikai térfogat az $N_s/N_t = TV^{1/3}$ dimenziótlan hányadossal jellemezhető. Az ábrán látható két esetben N_s/N_t értéke 3-tól 6-ig, illetve 3-tól 5.3-ig változik. Ez az előbbi esetben nyolcszoros, utóbbiban több, mint ötszörös változást jelent a térfogatban. Jól látható, hogy a csúcsok semmilyen térfogatfüggést nem mutatnak; ez a crossover egyértelmű jele. Megállapíthatjuk tehát, hogy $N_t = 4$ és 6 esetén nincs fázisátmenet. Ettől azonban még előfordulhat az a szerencsétlen eset, ami három azonos kvark íz esetén előfordult, hogy a diszkretizációs hibák csökkenésével megváltozik az átmenet rendje. Ahhoz, hogy ezt kizárhassuk, meg kell vizsgálnunk a szuszeptibilitás térfogatfüggését a kontinuum limeszben. Ehhez azonban előbb $\chi_{\bar{\psi}\psi}$ renormálására lesz szükség.



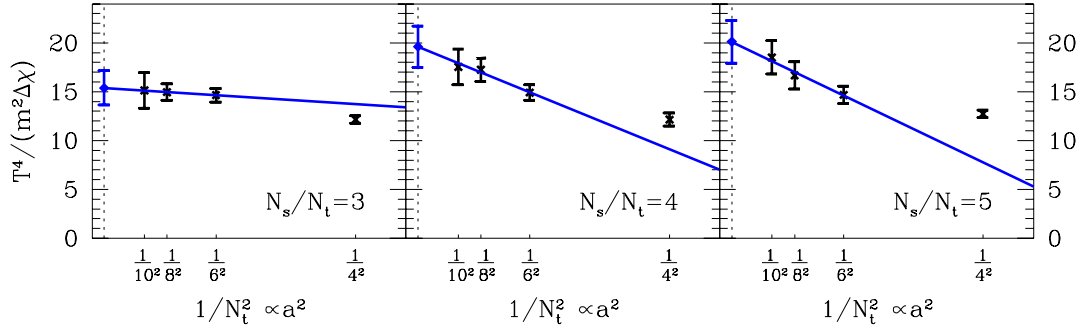
3.5. ábra. A királis szuszeptibilitás a β csatolás függvényében $N_t = 4$ és 6 rácson. A nagy térfogatkülönbségek ellenére a görbék nem mutatnak térfogatfüggést.

Csak olyan mennyiségeknek létezik kontinuum limesze, amelyek nem tartalmaznak ráczállandótól függő divergenciákat. Megmutatható, hogy a $-T/V \ln Z$ szabadenergiásűrűség a^{-4} , $m^2 a^{-2}$ és $m^4 \ln a$ típusú divergenciákat tartalmaz, ahol m bármely kvarktömeg lehet [53]. Így a királis szuszeptibilitás is tartalmaz kvadrátikus és logaritmikus divergenciákat, vagyis egy naiv $a \rightarrow 0$ limesz csupán ezekre a divergenciákra lenne érzékeny. További nehézség, hogy a szuszeptibilitást a csupasz kvarktömeg szerinti deriváltként értelmeztük, mely szintén tartalmazhat logaritmikus divergenciát. Szerencsére ezek a divergenciák a $m_{ud}^2 \partial^2 / \partial m_{ud}^2$ operátorból kiesnek. A szabadenergiásűrűségből származó divergenciáktól legyszerűbben úgy szabadulhatunk meg, ha $T = 0$ -n is meghatározzuk $\chi_{\bar{\psi}\psi}$ értékét ugyanazon ráczállandónál, és ezt levonjuk a $T > 0$ -n kapott értékből. A következőképpen definiálhatjuk tehát a renormált szuszeptibilitást:

$$m^2 \Delta \chi(T) = m_{ud}^2 (\chi_{\bar{\psi}\psi}(T) - \chi_{\bar{\psi}\psi}(T=0)). \quad (3.8)$$

Az így definiált mennyiség divergenciamentes, így létezik kontinuum limesze. Természetesen ehhez először meg kell határoznunk a szuszeptibilitás értékét nulla hőmérsékleten is. Ez azonban megtehető a skála beállításához használt rácson. A négy kvarktömeg mellett megmért $\chi_{\bar{\psi}\psi}$ értékeket vezető rendű királis perturbációs számítás segítségével extrapolálhatjuk a fizikai kvarktömeghez. Az öt β értéknél megmért szuszeptibilitást ezután interpolációval terjeszthetjük ki az általunk vizsgált tartományon belül tetszőleges β értékre.

Stratégiánk ezek után a következő: három különböző N_s/N_t érték mellett meghatározzuk az $m^2 \Delta \chi$ renormált szuszeptibilitás maximumának kontinuum



3.6. ábra. A renormált szuszeptibilitás kontinuum extrapolációja három térfogat esetén, melyek $N_s/N_t = 3, 4, 5$ -nek felelnek meg. A szuszeptibilitást T^4 -nel dimenziótlanítottuk.

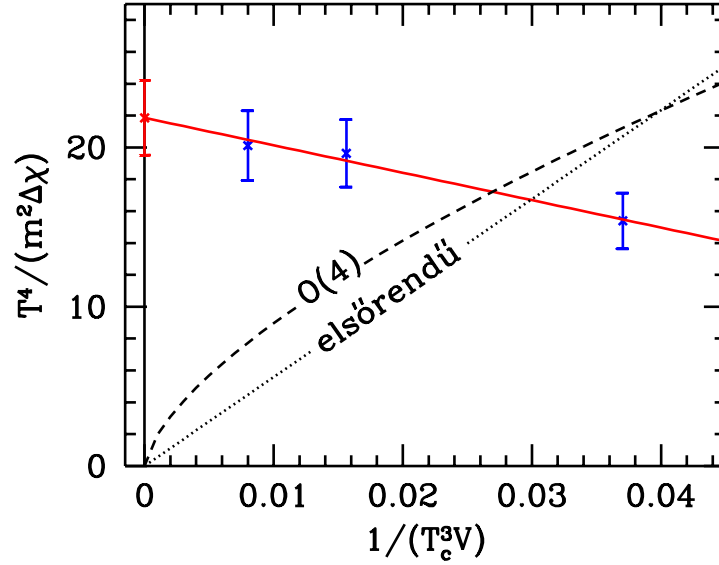
limeszét, majd a kontinuum értékek térfogatfüggését vizsgáljuk. E térfogatfüggés alapján aztán meg tudjuk határozni az átmenet rendjét. Négy különböző rácsméretet használunk, melyek $N_t = 4, 6, 8, 10$ -nek felelnek meg. A csúcsokban $\chi_{\bar{\psi}\psi}$ értékét így összesen 12 pontban határoztuk meg, a használt $T > 0$ rácok mérete $12^3 \cdot 4$ -től $48^3 \cdot 10$ -ig terjedt. A generált konfigurációk száma 1500 és 8000 között volt minden pontban. Néhány esetben a számítógépes architektúra nem tette lehetővé bizonyos rácsméretok használatát. Ezekben az esetekben a legközelebbi térfogatoktól interpoláltunk/extrapoláltunk. Mivel a térfogatfüggés mindenhol minimális volt, ezért ez az eljárás megbízhatónak bizonyult.

A 3.6 ábra mutatja a kontinuum extrapolációkat az $N_s/N_t = 3, 4, 5$ -nek megfelelő térfogatok esetén. Mivel a staggered regularizációban a vezető rendű diszkretizációs effektusok a^2 -tel arányosak, így a szuszeptibilitások értékét $1/N_t^2$ függvényében ábrázoltuk, mely konstans hőmérsékletet feltételezve a^2 -tel arányos. Mindhárom esetben láthatjuk, hogy az $N_t = 4$ rácok még nincsenek a skálázó tartományban, azonban az $N_t = 6, 8, 10$ rácokon mért eredmények már lineárisan függenek a^2 -től. Így ezeket a pontokat használva a kontinuum extrapoláció biztonságosan elvégezhető.

Analízisünk utolsó lépése $m^2 \Delta \chi$ kontinuum értékének vizsgálata a térfogat függvényében. Mivel fázisátmenetek esetén szingularitást várnánk végtelen térfogaton, így $m^2 \Delta \chi$ helyett annak inverzét vizsgáljuk T^4 -nel dimenziótlanítva az inverz térfogat függvényében. A 3.7 ábrán láthatjuk az eredményt. Az $1/V = 0$ végtelen térfogati limeszben az inverz szuszeptibilitás értéke pozitív:

$$T^4/(m^2 \Delta \chi)|_{V \rightarrow \infty} = 22(2), \quad (3.9)$$

mely 11σ -ra van a nullától. Nagy biztonsággal kizárható tehát, hogy valódi fázisátmenet történik a QCD-ben a hadronikus és kvark-gluon fázisok között. Ér-



3.7. ábra. Az inverz renormált szuszeptibilitás kontinuum limeszének térfogatfüggése. A folytonos vonal az $1/V$ -ben lineáris végtelen térfogati extrapolációt mutatja. A pontozott és szaggatott vonalak feltételezett elsőrendű, illetve $O(4)$ másodrendű fázisátmenet esetén a legjobb illesztett görbék.

dekességeként felrajzoltuk az adatokra legjobban illeszkedő vezető rendű görbéket elsőrendű és $O(4)$ univerzalitási osztályba tartozó másodrendű fázisátmenetek esetére. E lehetőségek megvalósulásának a valószínűsége 10^{-19} illetve $7 \cdot 10^{-13}$.

3.4. Az átmeneti hőmérséklet

Miután megállapítottuk, hogy nincs fázisátmenet a QCD-ben, áttérünk a crossover T_c hőmérsékletének meghatározására [36]. Az irodalomban több olyan munkát is találunk, mely T_c meghatározását tűzi ki célul akár staggered, akár Wilson fermionokkal [34, 50, 54–59]. Ezen analízisek mindegyikének vannak azonban hiányosságai. Általában nem fizikai kvarktömegeket használnak, nincs megbízható kontinuum extrapoláció, pontatlan a skála beállítása és figyelmen kívül hagyják az átmenet crossover jellegét. Célunk az, hogy ezeket a hiányosságokat kiküszöböljük és ezáltal megbízható, néhány százalék pontosságú értéket adjunk T_c -re. Ehhez az alábbi négy problémára kell nagyobb hangsúlyt fektetnünk.

(1) Már a fázisátmenet rendjének meghatározásakor láttuk, hogy nagyon fontos a fizikai kvarktömegek használata a $T > 0$ szimulációkban. Ez a T_c meghatározása során is igaz, ugyanis nem ismerjük T_c pontos kvarktömeg függését, így nagyobb kvarktömegektől nem tudunk megfelelő pontossággal extrapolálni.

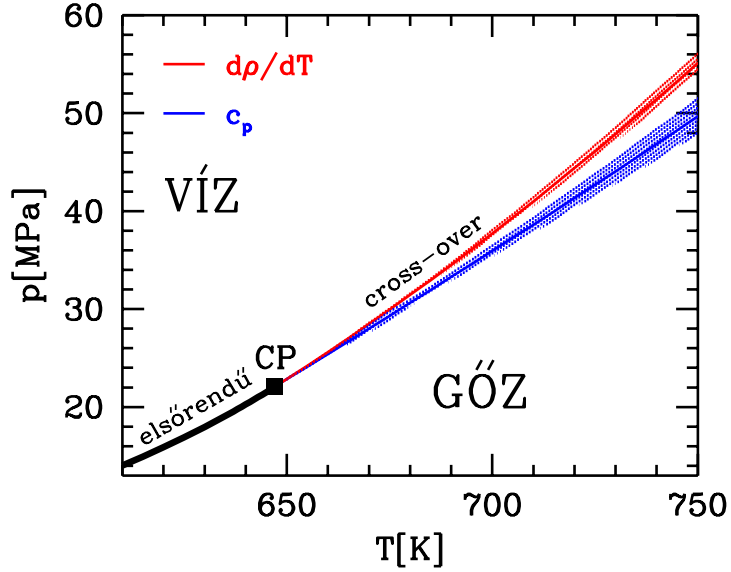
(2) A kontinuum limesz végrehajtása minden rács analízis esetén alapvető fontosságú. Láttuk az átmenet rendjének meghatározásánál, hogy az $N_t = 4$ rácsok még nem megbízhatóak, nincsenek a skálázó tartományban. Ahhoz, hogy egyáltalán el tudjuk dönteni, fennáll-e már az a^2 -ben lineáris skálázás, legalább három olyan rácsállandóra van szükségünk, melyek már ebben a tartományban vannak. Mivel $N_t = 4$ még nem ilyen, ezért minimálisan további három rácsállandóra van szükségünk.

(3) Mint később látni fogjuk, T_c meghatározásában alapvető szerepet játszik a skála pontos meghatározása. Bár még ma is viszonylag elterjedt az r_0 vagy σ használata, mi a 3.2 szakaszban leírt –kísérletileg közvetlenül mérhető mennyiségeken alapuló– LCP-t használjuk. A rácsállandót ebben az esetben f_K értéke határozza meg.

(4) Mivel az átmenet crossover, ezért T_c csak pontos definíció mellett értelmezhető. Különböző definíciók különböző értéket adhatnak. Jól illusztrálja a helyzetet a víz példája. A 3.8 ábra mutatja a víz fázisdiagramját a nyomás hőmérséklet síkon. A víz-gőz átmenet hőmérsékletét többféleképpen definiálhatjuk. Két példa az állandó nyomású fajhőnek (c_p) vagy a sűrűség hőmérséklet szerinti deriváltjának ($d\rho/dT$) a maximuma. A kritikus ponthoz tartozó $p_c = 22.064$ MPa nyomás alatt a fázisátmenet elsőrendű, a különböző definíciók azonos T_c -t adnak: a szingularitás helyét. Ha $p > p_c$, akkor nincs fázisátmenet, csak crossover. Mivel nincs szingularitás, c_p és $d\rho/dT$ különböző helyeken veszi fel maximumát, más T_c -t definiálnak.

Hasonló a helyzet a QCD-ben is: nincs univerzális T_c , a különböző definíciók eltérő eredményekre vezethetnek. Ezért fontos, hogy T_c -t mindig a pontos definícióval együtt adjuk meg.

A következőkben három különböző definíciót használunk, és mindháromhoz megadjuk T_c értékét, melyek több mint 10%-kal különbözhetnek egymástól. Az analízis mindhárom esetben hasonlóan megy. Ugyanazokat a $T > 0$ konfigurációkat használhatjuk, melyeket az átmenet rendjének meghatározásához generáltunk. E konfigurációk lefedik az átmeneti pont környékét az LCP mentén. T_c meghatározásához meg kell határoznunk ezeken a konfigurációkon a definíciónak megfelelő mennyiséget, valamint a β csatolásnak megfelelő rácsállandókból a $T = 1/N_t a$ összefüggés szerint a hőmérsékleteket. Mivel az átmenet rendjére vonatkozó analízis azt mutatta, hogy $N_s \geq 4N_t$ esetén már nincs észrevehető térfogatfüggés, így az $N_s = 4N_t$ rácsokat használtuk $N_t = 4, 6, 8, 10$ esetén.



3.8. ábra. A víz fázisdiagramja a kritikus pont (CP) környékén. p_c -nél kisebb nyomás esetén az átmenet elsőrendű (fekete vonal), míg $p > p_c$ esetén crossover. A crossover tartományban a fajhő c_p és a sűrűség hőmérséklet szerinti deriváltja ($d\rho/dT$) különböző T_c -t definiál (kék illetve piros vonalak). A színes sávok a kísérleti hibákat jelzik [60].

3.4.1. Királis szuszceptibilitás

Első definíciónk a már korábban definiált $\chi_{\bar{\psi}\psi}$ királis szuszceptibilitáson alapul. A célunk T_c kontinuum limeszének meghatározása, ezért fontos renormált mennyiségeket használnunk a definíciók során. Láttuk, hogy $\chi_{\bar{\psi}\psi}$ renormálása $m^2\Delta\chi$ -re vezet, melyet T^4 -nel dimenziótlaníthatunk. $T_c(\chi_{\bar{\psi}\psi})$ értékét ezek után az $\frac{m^2\Delta\chi}{T^4}(T)$ függvény maximum helyeként definiáljuk.

A 3.9 ábra felső részén láthatjuk $m^2\Delta\chi/T^4$ -t a hőmérséklet függvényében négy különböző N_t esetén. Azt várjuk, hogy a kontinuum limeszhez közel, azaz nagy N_t -re ezek a görbék egybeesnek. Látható, hogy az $N_t = 4$ görbe jelentősen eltér a többitől: a diszkretizációs effektusok ezeken a rácson még meglehetősen nagyok. Az utolsó két görbe, $N_t = 8$ és 10 , azonban már konzisztens egymással. A görbék maximuma jelöli ki az átmeneti hőmérsékletet mind a négy N_t esetén. A maximum helyének pontos meghatározásához a csúcs közelében levő pontokra kvadratikus görbét illesztettünk. Az illesztési tartománytól a csúcs helye enyhén függ, ezt szisztematikus hibaként vesszük figyelembe. A 3.10 ábra bal oldalán láthatjuk a négy N_t -hez tartozó T_c értékek kontinuum extrapolációját. Ismét megállapíthatjuk, hogy az $N_t = 4$ pont még nincs a skálázó tartományban, a másik három rácsállandó azonban tökéletes skálázást mutat. Az extrapoláció szisztematikus hibájának becsléséhez meghatároztuk a kontinuum limeszt az

$N_t = 6, 8, 10$, illetve csak az $N_t = 8, 10$ pontokat használva is. A két eredmény átlagát fogadtuk el T_c kontinuum értékének, különbségüket pedig hozzáadtuk a szisztematikus hibákhoz. A királis szuszceptibilitáson alapuló átmeneti hőmérséklet ezek alapján:

$$T_c(\chi_{\bar{\psi}\psi}) = 151(3)(3) \text{ MeV}, \quad (3.10)$$

ahol az első hiba a $T > 0$ analízisek statisztikus és szisztematikus hibáinak négyzetes összege, a második pedig a $T = 0$ skálameghatározás 2%-os bizonytalansága.

A királis szuszceptibilitás görbék jól mutatják, hogy az átmenet egy meglehetősen széles hőmérséklet tartományban megy végbe. Így T_c -n túl érdekes lehet még ezen átmeneti tartomány szélességének megadása is. A görbék szélességét többféleképpen is definiálhatjuk. Egyik lehetőség a második derivált csúcsban felvett értékének használata. Ennek segítségével: $(\Delta T_c)^2 = -\chi_{\bar{\psi}\psi}(T_c)/\chi_{\bar{\psi}\psi}''$. (Gauss-függvényre ez a definíció épp a szokásos szélességet adja.) A szélességre ez alapján

$$\Delta T_c(\chi_{\bar{\psi}\psi}) = 28(5)(1) \text{ MeV} \quad (3.11)$$

adódik. A csúcs nagy szélességéből következik, hogy amennyiben $m^2\Delta\chi$ -t nem T^4 -nel, hanem T más hatványával normáljuk (továbbra is dimenziótlanítva például a piontömeg bevonásával: $m^2/m_\pi^2\Delta\chi/T^2$ vagy $m^2/m_\pi^4\Delta\chi$), akkor 10-20 MeV-vel eltolódhat a csúcs helye.

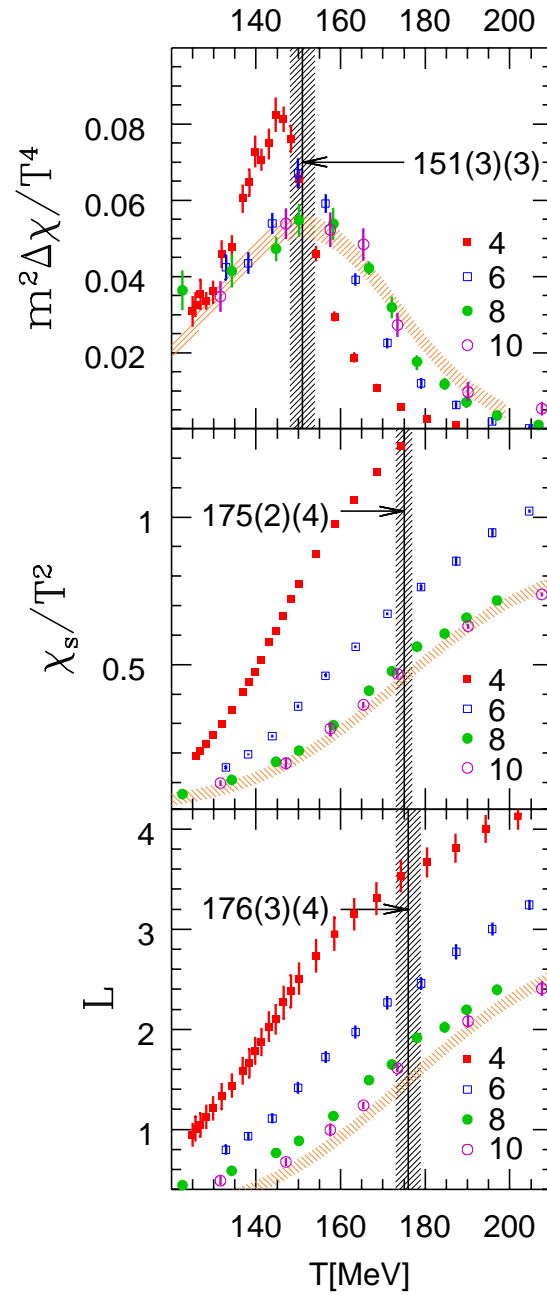
A MILC kollaboráció az [58] referenciában szintén a királis szuszceptibilitást használta T_c értékének meghatározásához. Az eredményük: $T_c = 169(12)(4) \text{ MeV}$. $N_t = 4, 6$ és 8 rácsokat használtak a fizikainál nagyobb kvarktömegek esetén. A legkisebb kvarktömegük 220 MeV-es piontömegnek felel meg. A szimulációkhoz az R algoritmust használták, melyről láttuk, hogy nem egzakt, továbbá a csupasz $\chi_{\bar{\psi}\psi}/T^2$ szuszceptibilitással definiálták T_c -t. A T^2 -es normálás a korábbiak szerint körülbelül 9 MeV-vel emeli T_c értékét a T^4 -es normáláshoz képest. Figyelembe véve ezt az effektust, valamint a megadott bizonytalanságaikat, megállapíthatjuk, hogy a két eredmény konzisztens egymással.

3.4.2. Kvarkszám szuszceptibilitás

Második mennyiségünk a nehézion fizikai kísérletek szempontjából fontos szerepet játszó kvarkszám szuszceptibilitás. A ritka kvark szuszceptibilitása a kísérletekben mérhető ritkaság fluktuációkkal hozható kapcsolatba. A ritka kvarkszám szuszceptibilitás definíciója:

$$\frac{\chi_s}{T^2} = \frac{1}{TV} \left. \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \mu_s^2} \right|_{\mu_s=0}, \quad (3.12)$$

ahol μ_s a ritka kvark kémiai potenciálja. A kémiai potenciál pontos bevezetését a 4. fejezetben tárgyaljuk. A kvarkszám szuszceptibilitás nevével ellentétben nem



3.9. ábra. A renormált királis szuszeptibilitás ($m^2 \Delta\chi / T^4$), a ritka kvarkszám szuszeptibilitás (χ_s / T^2) és a renormált Poljakov hurok (L) hőmérsékletfüggése. A különböző színek és szimbólumok különböző N_t -ket jelölnek (piros teli és kék üres négyzetek $N_t = 4$ illetve 6, zöld teli és lila üres körök $N_t = 8$ illetve 10-nek felelnek meg). A függőleges vonalak és sávok a megfelelő kontinuum extrapolált átmeneti hőmérsékleteket jelölik a bizonytalanságokkal együtt. A narancssárga sávok a becsült kontinuum görbéket jelölik mindhárom mennyiség esetén.

szuszeptibilitás, hanem inkább rendparaméter jellegű mennyiség. Ennek oka az, hogy Z a μ -nek páros függvénye, így a természetes paraméter μ^2 , ennek segítségével pedig χ_s első deriváltként felírható. A kvarkszám szuszeptibilitás kedvező tulajdonsága, hogy nincs szükség renormálására, közvetlenül létezik kontinuum limesze. A 3.9 ábra középső részén láthatjuk χ_s/T^2 -t a hőmérséklet függvényében. Ezen is látható, hogy az $N_t = 4$ görbe távol áll a többiektől, míg az $N_t = 8$ és 10-hez tartozók már majdnem azonosak. Az átmeneti hőmérsékletet a görbék hőmérséklet szerinti deriváltjának maximumaként definiáljuk, mely χ_s/T^2 inflexiós pontja. Ezen pontok megkeresésére két módszert is alkalmaztunk, melyek egymással konzisztens eredményt adtak. Elsőként a numerikusan meghatározott derivált maximumát kerestük ugyanúgy, ahogy a királis szuszeptibilitás esetében. A másik módszer esetében közvetlenül az eredeti pontokra illesztettünk harmadfokú polinomot, melynek inflexiós pontja definiálta T_c -t. Az illesztéshez használt tartományt ezúttal is változtattuk, T_c ettől való függése a szisztematikus hibához ad járulékot. A 3.10 ábra középső részén láthatjuk a kontinuum extrapolációt. Az $N_t = 6, 8, 10$ pontok már a skálázó tartományban vannak. A kontinuum érték szisztematikus hibáját most is két-, illetve három pontra illesztve határoztuk meg. Az átmeneti hőmérséklet értéke számottevően magasabb, mint a királis szuszeptibilitással kapott T_c . A különbség $24(4)$ MeV. Eredményünk tehát a kvarkszám szuszeptibilitásból definiált átmeneti hőmérsékletre:

$$T_c(\chi_s) = 175(2)(4) \text{ MeV.} \quad (3.13)$$

Az első hiba most is a $T > 0$, a második a $T = 0$ analízisből származik. Láthatjuk, hogy a hőmérsékletkülönbség hibája kisebb, mint az egyes T_c értékeké. Ennek az az oka, hogy a különbség lényegesen kevésbé érzékeny a skálából származó bizonytalanságra.

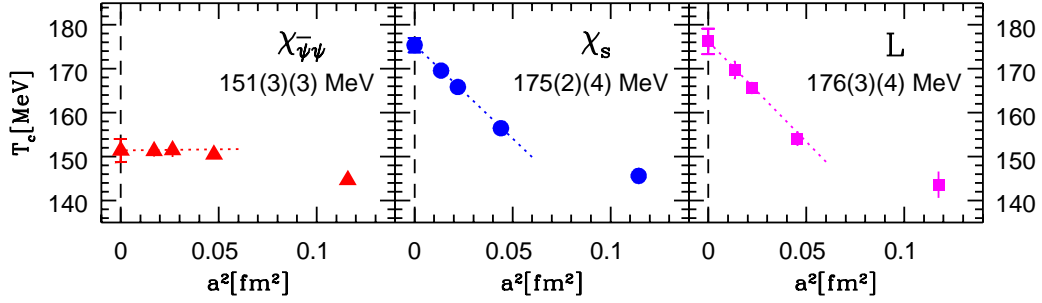
Az átmeneti tartomány szélességét a királis szuszeptibilitásához hasonlóan, ezúttal a harmadik derivált segítségével határozhatjuk meg (mely az illesztett harmadfokú polinomból azonnal adódik):

$$\Delta T_c(\chi_s) = 42(4)(1) \text{ MeV.} \quad (3.14)$$

3.4.3. Poljakov hurok

A tiszta mértékelméletben megvalósuló elsőrendű fázisátmenet rendparamétere a Poljakov hurok, melynek definíciója:

$$L = \frac{1}{N_s^3} \sum_{x|x_4=0} \text{Tr} \left[U_{x;4} U_{x+a\hat{4};4} \cdots U_{x+(N_t-1)a\hat{4};4} \right], \quad (3.15)$$



3.10. ábra. Az átmeneti hőmérsékletek kontinuum extrapolációja és kontinuum limesze a renormált királis kondenzátum, a ritka kvarkszám szuszceptibilitás és a Poljakov hurok esetén.

azaz az időirányú linkek szorzata minden időirányú vonal mentén. Bár a fizikai kvarktömegek a QCD skálához képest inkább a nullához vannak közel, mint a végtelenhez, mégis érdemes megvizsgálni, hogyan viselkedik a Poljakov hurok. Ez lesz tehát a harmadik mennyiségünk, melyet T_c meghatározásához használunk. A Poljakov hurok abszolút értéke egy egymástól végtelen távolságra levő nehéz kvark-antikvark rendszer szabadenergiájával kapcsolatos:

$$|\langle L \rangle|^2 = e^{-\Delta F_{q\bar{q}}(r \rightarrow \infty)/T}, \quad (3.16)$$

ahol $\Delta F_{q\bar{q}}$ a nehéz kvark-antikvark rendszer többletenergija a kvark-gluon plazma szabadenergiájához képest. Tiszta mértékelméletben alacsony hőmérsékleten, a bezárás miatt $\Delta F_{q\bar{q}}(r \rightarrow \infty) \rightarrow \infty$, így $|\langle L \rangle| = 0$. Magas hőmérsékleten a bezárás megszűnik, így $\Delta F_{q\bar{q}}$ és ezáltal $|\langle L \rangle|$ is végessé válik. QCD-ben, mint már említettük, a húr szakadása miatt $\Delta F_{q\bar{q}}$ nem tart végtelenhez, vagyis a Poljakov hurok alacsony hőmérsékleten sem nulla.

A Poljakov hurok abszolút értéke a kontinuum limeszben nullához tart. Ezt a kvark-antikvark szabadenergiában megjelenő divergenciák okozzák. A renormálás a királis szuszceptibilitáshoz hasonlóan megy, a szabadenergiát a $T = 0$ szabadenergia levonásával renormálhatjuk. Ez L -ben multiplikatív renormálást eredményez. A $T = 0$ kvark-antikvark szabadenergia épp a $V(r)$ potenciál, melyet a Wilson-hurkok segítségével tudunk meghatározni. Mivel V távolságfüggő, végtelen sok különböző renormálási feltételt tudunk definiálni. Egy egyszerű lehetőség a

$$V_R(r_0) = 0 \quad (3.17)$$

feltétel kiszabása a renormált nulla hőmérsékletű potenciálra [61]. Ez a feltétel tetszőleges rácsállandó mellett rögzíti a levonást, és garantálja $V(r)$ végességét. Ezek után tetszőleges hőmérsékleten a $\Delta F_{q\bar{q}}(r)$ szabadenergia renormálása a

$$\Delta F_{R;q\bar{q}}(r) = \Delta F_{q\bar{q}}(r) - V(r_0), \quad (3.18)$$

ahol $V(r_0)$ a nem renormált $T = 0$ potenciál a Sommer-paraméter értékénél. A renormált Poljakov hurok ezek alapján:

$$|\langle L_R \rangle| = |\langle L \rangle| e^{V(r_0)/(2T)}. \quad (3.19)$$

A 3.9 ábra alsó részén láthatjuk a renormált Poljakov hurkot a hőmérséklet függvényében. Az $N_t = 4$ görbe szokás szerint nagyon kilóg a sorból. Az átmeneti pont definíciójára itt is az inflexiós pontot használtuk, melyet ugyanazon két módszerrel határoztunk meg, mint a kvarkszám szuszeptibilitás esetén. A bizonytalanságokat is az előzőekhez hasonlóan becsültük. A 3.4 ábra jobb oldalán láthatjuk a kontinuum extrapolációt, mely nagyon hasonlít χ_s -hez. $N_t = 6, 8, 10$ -et használva ezúttal is megbízható kontinuum limeszt kaphatunk. T_c értéke ezúttal 25(4) MeV-vel van magasabban, mint a királis kondenzátumból kapott érték, és konzisztens a kvarkszám szuszeptibilitás által adott T_c -vel:

$$T_c(L) = 176(3)(4) \text{ MeV}. \quad (3.20)$$

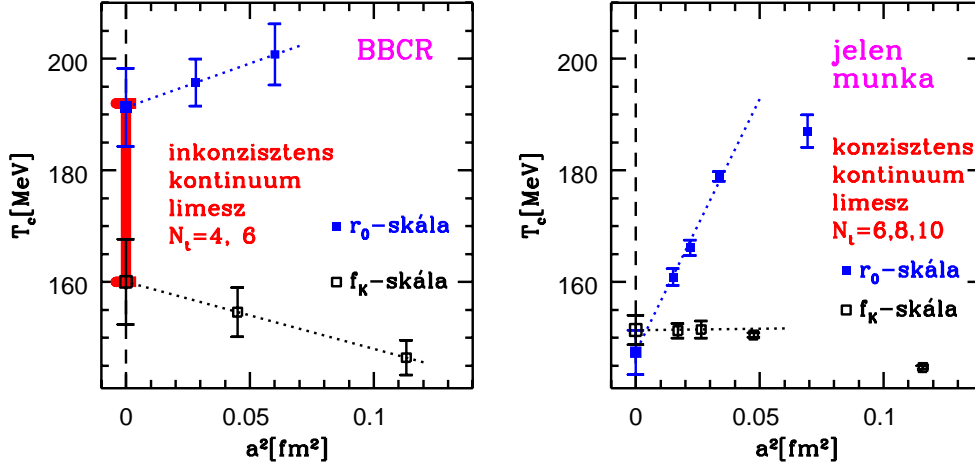
A hibák jelentése ugyanaz, mint korábban. Az átmenet szélessége

$$\Delta T_c(P) = 38(5)(1) \text{ MeV}. \quad (3.21)$$

Megállapíthatjuk tehát, hogy az átmeneti hőmérséklet definíciótól függően egy 25-30 MeV-es tartományban változhat, és egy-egy konkrét esetben is az átmeneti tartomány szélessége 30-40 MeV.

A közelmúltban a Bielefeld-Brookhaven-Columbia-Riken kollaboráció elvégzett egy teljesen független analízist és az előbbiekkal inkonzisztens eredményre jutott [59]. A QCD átmeneti hőmérsékletét vizsgálták p4fat3 javított staggered rács hatás alkalmazásával $N_t = 4$ és 6 rácson. Ez a hatás a nagyon nagy hőmérsékletű viselkedést javítja jelentősen, ugyanakkor $T = 0$ -ra –ami a skála beállításához fontos– nincs optimalizálva. Fontos megjegyezni ugyanakkor, hogy a p4fat3 hatás számítógépigénye nagyságrendekkel nagyobb az általunk használt stout hatásához képest. Ez az oka annak, hogy jelenleg csak két N_t -re van eredmény. A rácsállandót az r_0 paraméter segítségével állították be. A királis szuszeptibilitásból és a Poljakov hurok szuszeptibilitásból egyaránt $T_c = 192(7)(4)$ MeV értéket kaptak. Ez egyértelműen különbözik a királis szuszeptibilitásból kapott $T_c = 151(3)(3)$ értékünkötől. A következőkben azt vizsgáljuk, mi lehet az eltérés oka.

Mivel más mennyiséget használtak a rácsállandó beállítására, és ez véges rácsállandókon komoly eltéréseket okozhat, a jobb összevetés érdekében két dolgot



3.11. ábra. Az átmeneti hőmérséklet kontinuum extrapolációja az [59] referencia (bal oldal) adatai alapján és a saját adatokból (jobb oldal). Mindkét esetben a skálát r_0 (teli négyzetek) és f_K (üres négyzetek) segítségével is be lehet állítani. Míg az [59] referencia esetében a két kontinuum limesz nem konzisztens, addig a saját $N_t = 6, 8, 10$ adatokat extrapolálva egymással konzisztens értékeket kapunk.

érdeemes tenni. Egyrészt megvizsgáljuk, hogyan változnak a saját eredményeink, ha mi is r_0 -al állítjuk be a skálát, másrészt fordítva: az ő esetükben f_K skálával mi történik. Természetesen korrekt kontinuum limesz esetén az eredmény nem függhet a skála beállításához használt mennyiségtől. Mivel a [59] publikáció nem tartalmazott adatokat f_K értékére vonatkozóan, így megismételtük futtatásaik egy részét és meghatároztuk f_K értékét az általuk használt paramétereknél $T = 0$ rácson. Mivel egy teljes analízis nagyon sok időt igényel, így a kisebb kvarktömegekre a már korábban említett *partial quenching* technikát alkalmaztuk. Saját adatainkon ellenőriztük, hogy ezzel az eljárással f_K értéke néhány százalék pontossággal megközelíti a dinamikus szimulációval kapott értéket.

A 3.11 ábra jól mutatja az ellentmondás fő okát. A bal oldali ábrán láthatjuk a BBCR kollaboráció által meghatározott T_c értékeket $N_t = 4$ és 6 rácson r_0 -al és f_K -val beállított ráczállandó esetén. Jól látható, hogy míg az r_0 -al beállított pontok az általuk is idézett 192 MeV kontinuum limeszt adják, addig az f_K -val meghatározott pontok 30 MeV-vel alacsonyabb hőmérsékletet adnak. Figyelembe véve, hogy χ/T^2 -et használták a T_c definíciójához, ez utóbbi érték konzisztens az általunk kapottal. A jobb oldali ábrán a saját pontjainkat láthatjuk, szintén r_0 , illetve f_K skálák esetén. Látható, hogy amennyiben csak az $N_t = 4$ és 6 pontokat használnánk a kontinuum extrapolációhoz, ugyanez lenne a helyzet: a kontinuum limeszek inkonzisztensek lennének. Az $N_t = 6, 8, 10$ pontokat használva azonban (ahogy ezt korábban is tettük) az r_0 és f_K skála beállítással kapott pontok

ugyanazt a kontinuum limesz adják.

Megállapíthatjuk, hogy az eltérés nagyrészt abból adódik, hogy az $N_t = 4$ és 6 rácscok még nincsenek a skálázó tartományban, nem használhatóak biztonságosan a kontinuum extrapolációhoz.

3.5. Az állapotegyenlet

Az átmenet rendjének és hőmérsékletének meghatározása után továbblépünk és kiterjesztjük analízisünket egy nagyobb hőmérséklet tartományra [35]. A hadron-anyag és a kvark-gluon plazma egyensúlyi termodinamikai leírásához az állapotegyenletet kell meghatároznunk. Állapotegyenlet alatt a termodinamikai állapotjelzők közötti függvénykapcsolatot értjük. Általában a nyomást határozzuk meg a hőmérséklet függvényében. Ebből könnyen származtathatjuk a többi mennyiséget (energiasűrűség, entrópiasűrűség, hangsebesség), mint a hőmérséklet függvényét.

A közelmúltban az állapotegyenlet meghatározásáról több dolgozat is született. A tiszta SU(3) mértékelmélet állapotegyenletét több különböző rács hatás segítségével vizsgálták [62–64]. Minden esetben sikerült az állapotegyenlet körülbelül $4T_c$ -ig megadni a kontinuum limeszben. Az eredmények között van néhány százalékos eltérés, ez azonban a skála beállításából adódik (ez tiszta mértékelmélet esetén nem egyszerű, hiszen az nem a valódi fizika és nincsenek kísérleti eredmények). Teljes QCD analízist is találunk javítatlan staggered [30,31], illetve $\mathcal{O}(a)$ javított Wilson fermionokkal [65]. Egyértelműen a legjobbnak tekinthető (de legalábbis a leginkább elismert) korábbi eredmény a p4fat3 javított staggered hatással $N_t = 4$ rácson kapott állapotegyenlet [33]. Ezen analízis azonban –csakúgy, mint a korábbiak– több szempontból is problematikus. Mivel a célunk a hiányosságok kiküszöbölése, röviden áttekintjük ezeket.

(1) Többször említettük már a fizikai kvarktömegek használatának fontosságát a $T > 0$ szimulációkban. A [33] munkában használt legalacsonyabb kvarktömegek 600 MeV-es pionnak felelnek meg. Ahogy korábban is, a következő analízisben fizikai kvarktömegeket fogunk használni.

(2) A kontinuum limeszhez elengedhetetlen több ráczállandó használata. A csupán $N_t = 4$ rácson alapuló analízis helyett [33] két rács felbontást fogunk használni: $N_t = 4$ -et és 6-ot. Bár ez önmagában még nem elegendő a megbízható kontinuum extrapolációhoz, kétségtelenül szükséges lépés.

(3) Láttuk, hogy a staggered fermionok íz szimmetria sértése a p4 hatás esetén lényegesen nagyobb, mint az általunk használt stout javított staggered hatás esetén. Utóbbit használva a nehezebb pionok tömegei is az átmeneti hőmérséklet közelébe kerülnek.

(4) A p_4 hatással elvégzett analízis során végig R algoritmust használtak. Ehelyett mi, ahogy korábban is, az egzakt RHMC algoritmust választottuk.

(5) Egy komoly hiányossága a [33] munkának, hogy az analízis nem LCP mentén történt. A β csatolás változtatása során, mellyel, mint láttuk, a hőmérsékletet lehet hangolni, nem változtatták a csupasz tömeg paramétereit. Ennek következményeképpen, ha a $T = 3T_c$ -nek és $T = 0.7T_c$ -nek megfelelő rendszereiket lehűtjük nulla fokra, az első esetben a kvarkok négyszer-, a pionok pedig kétszer olyan nehezek lesznek, mint a második esetben. Természetesen a helyes eljárás az LCP követése. Mivel ezt az analízist időben korábban végeztük, mint a T_c meghatározását és az abszolút skála nem játszik olyan fontos szerepet, ezért a 3.2 ábrán látható közelítő LCP-t használtuk, a skálát azonban nem a vektor mezon tömegével, hanem az r_0 paraméterrel állítottuk be. Mivel a hőmérsékleteket mindig T_c egységekben adjuk meg, így az abszolút skálára, vagyis r_0 fizikai értékére nincs szükség. A különböző β értékekhez tartozó rácsállandók arányának meghatározására kitűnően alkalmas a nehéz kvark-antikvark potenciál és a belőle származtatott r_0 paraméter.

Nagy térfogatú, homogén rendszerre a nyomás a szabadenergiásűrűséggel arányos, mely a Z állapotösszeg logaritmusával:

$$p = \frac{T}{V} \ln Z. \quad (3.22)$$

A rácson természetesen a dimenziótlanított pa^4 kombinációt tudjuk meghatározni:

$$pa^4 = \frac{1}{N_t N_s^3} \ln Z. \quad (3.23)$$

Mivel a szabadenergiában a kontinuum limesz felé haladva divergenciák lépnek fel, így a nyomást renormálnunk kell. Ez, ahogy korábban is, a nulla hőmérsékletű szabadenergiásűrűség levonásával történik. Ehhez $T = 0$ rácson is meg kell határoznunk az állapotösszeget, melyet Z_0 -al jelölünk. A $T = 0$ rács mérete legyen $N_{s0}^3 \cdot N_{t0}$. Ekkor a renormált nyomás T^4 -nel normálva:

$$\frac{p_R}{T^4} = N_t^4 \left[\frac{1}{N_t N_s^3} \ln Z - \frac{1}{N_{t0} N_{s0}^3} \ln Z_0 \right]. \quad (3.24)$$

A továbbiakban az R indexet elhagyjuk, mivel mindig a renormált nyomás szerepel. Ezzel a renormálási definícióval a nyomás automatikusan teljesíti a $p(T = 0) = 0$ feltételt. Itt jegyezzük meg, hogy a divergenciák relatív súlya a nyomás számolása esetén ugyanazon rácsállandónál lényegesen nagyobb, mint a királis szuszceptibilitás esetén. Ez különösen nagy hőmérsékletekre igaz. Így a levonásnál két egymáshoz nagyon közeli számot kell kivonnunk, ehhez pedig nagy numerikus pontosságra van szükség. Ez az egyik oka annak, hogy –ellentétben

az átmeneti hőmérséklettel– az állapotegyenletet csak két rács felbontás esetén határoztuk meg. A másik ok azzal kapcsolatos, hogy nagy hőmérsékleten már $N_t = 4$ esetén is kicsi a rácsállandó, így a $T = 0$ futásokhoz nagy rácsoakra van szükség. $N_t = 4$ rácsokon $T = 2.5T_c$ -nél már ugyanakkora $T = 0$ rácsook kellenek a renormáláshoz, mint $N_t = 10$ rácsokon a T_c környékén.

A hőmérsékletet rögzített N_t esetén ezúttal is a β csatolással hangolhatjuk. Eközben természetesen végig az LCP-n kell maradnunk. A nyomás meghatározásához tehát $\ln Z$ -t és $\ln Z_0$ -t kell meghatároznunk az LCP mentén vett (β, am_q) paramétereknél, ahol az egyszerűség kedvéért m_q a könnyű és ritka kvarktömeget is jelöli. A 2.4 alfejezetben ismertetett fontossági mintavételezésen alapuló algoritmusok általában nem alkalmasak Z vagy $\ln Z$ meghatározására, hanem csak $\ln Z$ deriváltjait tudjuk közvetlenül kiszámítani. Ezért a nyomás kiszámítására az integrál módszert szokás alkalmazni [66]. Ennek során a nyomást a deriváltjai integráljaként állítjuk elő. A (β, am_q) többdimenziós síkon kell integrálnunk:

$$\frac{p}{T^4} = N_t^4 \int_{(\beta_0, am_{q0})}^{(\beta, am_q)} d(\beta, am_q) \left[\frac{1}{N_t N_s^3} \left(\frac{\partial \ln Z / \partial \beta}{\partial \ln Z / \partial (am_q)} \right) - \frac{1}{N_{t0} N_{s0}^3} \left(\frac{\partial \ln Z_0 / \partial \beta}{\partial \ln Z_0 / \partial (am_q)} \right) \right]. \quad (3.25)$$

Mivel az integrandus a nyomás gradiense, így az integrál értéke független az integrálási görbétől. Célszerű azonban az LCP mentén integrálni, hiszen a különböző hőmérsékletekhez tartozó integrálok (β, am_q) végpontjai mind az LCP-n vannak. Később látni fogjuk, hogy a $T = 0$ királis extrapolációk miatt célszerűbb kicsit más integrálási görbét választani.

Az integrál alsó határát úgy kell megválasztani, hogy ott az integrandus zérus legyen. Ez teljesül, amennyiben ez a pont jóval az átmeneti pont alatti hőmérsékletnek felel meg (általában $0.7T_c$ -nél már az elérhető numerikus pontosságig teljesül ez a feltétel). A mértékhatás (2.6) és a staggered hatás (2.9) alakjából egyszerűen látszik, hogy $\ln Z$ parciális deriváltjai mely mennyiségek várható értékeinek felelnek meg:

$$\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \langle -S_g / \beta \rangle \quad \frac{\partial \ln Z}{\partial (am_{ud})} = \langle \bar{\psi} \psi_{ud} \rangle \quad \frac{\partial \ln Z}{\partial (am_s)} = \langle \bar{\psi} \psi_s \rangle. \quad (3.26)$$

Ezek segítségével a nyomás a

$$\begin{aligned} \frac{p}{T^4} = N_t^4 \int_{(\beta_0, am_{ud0}, am_{s0})}^{(\beta, am_{ud}, am_s)} d(\beta, am_{ud}, am_s) \times \\ \left[\frac{1}{N_t N_s^3} \begin{pmatrix} \langle -S_g / \beta \rangle \\ \langle \bar{\psi} \psi_{ud} \rangle \\ \langle \bar{\psi} \psi_s \rangle \end{pmatrix} - \frac{1}{N_{t0} N_{s0}^3} \begin{pmatrix} \langle -S_g / \beta \rangle_0 \\ \langle \bar{\psi} \psi_{ud} \rangle_0 \\ \langle \bar{\psi} \psi_s \rangle_0 \end{pmatrix} \right] \end{aligned} \quad (3.27)$$

alakba írható, ahol $\langle \dots \rangle_0$ a $T = 0$ rácson számolt várható értéket jelöli.

Az integrál módszert eredetileg a tiszta mértékelméletre dolgozták ki, ahol a hatásnak csak egy paramétere van, így a nyomás egy egyszerű β integrállal felírható. Valamennyi korábbi staggered analízis is ugyanezt tette, ami nem helyes, hiszen az LCP mentén kell meghatároznunk az állapotegyenletet.

A megadott képletek a nyomást, mint β függvényét szolgáltatják. A $p(T)$ függvényhez természetesen szükségünk van még a hőmérséklet –vagy ami ezzel ekvivalens– a rácsállandó β függésére. Mivel más az LCP, mint korábban, így a 3.2 táblázat adatait nem használhatjuk. Korábban említettük, hogy T -t csak T_c egységekben akarjuk megadni, ezért csupán a rácsállandók arányaira van szükségünk. Ehhez elég a $T = 0$ rácson több β -nál a dimenziótlan r_0/a értékét meghatározni, ezek aránya megadja a rácsállandók arányát az r_0 fizikai értékének ismerete nélkül. A hőmérséklet skála abszolút értékének meghatározásához felhasználhatjuk a korábban meghatározott T_c értékeket. Az egyszerűség kedvéért minden esetben a renormálást nem igénylő kvarkszám szuszceptibilitásból származó T_c -t használjuk normálásra.

Az energiasűrűség (ϵ), az entrópiasűrűség (s) és a hangsebesség (c) a $p(T)$ függvényből a következő termodinamikai összefüggések alapján származtatható:

$$\epsilon = T(\partial p / \partial T) - p, \quad s = (\epsilon + p)T, \quad c_s^2 = \frac{dp}{d\epsilon}. \quad (3.28)$$

A deriváltakat a meghatározott $p(T)$ függvényből numerikusan számíthatjuk ki.

Az irodalomban általában más módszert szoktak alkalmazni az energiasűrűség meghatározására. Az energiasűrűség $\epsilon(T) = T^2/V \partial \log Z / \partial T$ alakját és a hőmérséklet és térfogat rácsállandóhoz való viszonyát felhasználva könnyen belátható, hogy

$$\frac{\epsilon - 3p}{T^4} = -\frac{N_t^3}{N_s^3} a \frac{d(\log Z)}{da}. \quad (3.29)$$

Tehát az $\epsilon - 3p$ kombinációt közvetlenül meghatározhatjuk a rácsállandó szerinti teljes derivált segítségével. Ezt természetesen a β és kvarktömegek szerinti deriváltakra kell átírni. A renormálás ugyanúgy történik, mint a nyomás esetén. Ezek után az energiasűrűség már egy egyszerű összeadással kiszámítható. Az $\epsilon - 3p$ mennyiséget szokás kölcsönhatási mértéknek is nevezni, mivel értéke végtelen hőmérsékleten nullához tart, így a kölcsönhatás mértékét méri.

A továbbiakban az energiasűrűséget a nyomásból származtatjuk a (3.28) képlet alapján. Ennek oka a következő. Ahogy korábban is, $T = 0$ -n a fizikainál nagyobb m_{ud} kvarktömegeket használunk és királis perturbációs számítás segítségével extrapolálunk a fizikai értékhez. Az extrapoláció alakja azonban nem minden mennyiségre ismert. A nyomáshoz szükséges $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$ királis kondenzátumokról

β	am_s	$T = 0$	$T > 0$	β	am_s	$T = 0$	$T > 0$
3.000	0.1938	$16^3 \cdot 16$	$12^3 \cdot 4$	3.450	0.1507	$16^3 \cdot 32$	$18^3 \cdot 6$
3.150	0.1848	$16^3 \cdot 16$	$12^3 \cdot 4$	3.500	0.1396	$16^3 \cdot 32$	$18^3 \cdot 6$
3.250	0.1768	$16^3 \cdot 16$	$12^3 \cdot 4$	3.550	0.1235	$16^3 \cdot 32$	$18^3 \cdot 6$
3.275	0.1742	$16^3 \cdot 16$	$12^3 \cdot 4$	3.575	0.1144	$16^3 \cdot 32$	$18^3 \cdot 6$
3.300	0.1713	$16^3 \cdot 16$	$12^3 \cdot 4$	3.600	0.1055	$16^3 \cdot 32$	$18^3 \cdot 6$
3.325	0.1683	$16^3 \cdot 16$	$12^3 \cdot 4$	3.625	0.0972	$16^3 \cdot 32$	$18^3 \cdot 6$
3.350	0.1651	$16^3 \cdot 16$	$12^3 \cdot 4$	3.650	0.0895	$16^3 \cdot 32$	$18^3 \cdot 6$
3.400	0.1583	$16^3 \cdot 16$	$12^3 \cdot 4$	3.675	0.0827	$16^3 \cdot 32$	$18^3 \cdot 6$
3.450	0.1507	$16^3 \cdot 32$	$12^3 \cdot 4$	3.700	0.0766	$16^3 \cdot 32$	$18^3 \cdot 6$
3.500	0.1396	$16^3 \cdot 32$	$12^3 \cdot 4$	3.750	0.0666	$16^3 \cdot 32$	$18^3 \cdot 6$
3.550	0.1235	$16^3 \cdot 32$	$12^3 \cdot 4$	3.800	0.0589	$20^3 \cdot 40$	$18^3 \cdot 6$
3.600	0.1055	$16^3 \cdot 32$	$12^3 \cdot 4$	3.850	0.0525	$20^3 \cdot 40$	$18^3 \cdot 6$
3.650	0.0895	$16^3 \cdot 32$	$12^3 \cdot 4$	3.930	0.0446	$24^3 \cdot 48$	$18^3 \cdot 6$
3.700	0.0766	$16^3 \cdot 32$	$12^3 \cdot 4$	4.000	0.0401	$28^3 \cdot 56$	$18^3 \cdot 6$
3.850	0.0525	$20^3 \cdot 40$	$12^3 \cdot 4$				
4.000	0.0401	$28^3 \cdot 56$	$12^3 \cdot 4$				

3.3. táblázat. Az állapotegyenlethez használt szimulációs pontok $N_t = 4$ és 6 rácson. A fizikai m_{ud} kvarktömeg 25-ször kisebb, mint a táblázatban szereplő m_s értékek. A $T > 0$ szimulációk a táblázatban szereplő β és m_s értékeknél, valamint egyszeres és háromszoros m_{ud} -nél történtek. A $T = 0$ futtatások során négy különböző könnyű kvarktömeget használtunk, melyek m_{ud} 3, 5, 7 és 9-szeresének feleltek meg.

tudjuk, hogy vezető rendben lineáris függvényei a kvarktömegnek. A mértékhatásnak és $\epsilon - 3p$ -nek nem ismerjük a pontos tömegfüggését. Ezért a nyomás meghatározásához először egy magasabb $3m_{ud}$ -nek megfelelő LCP-n integrálunk, majd rögzített β mellett jutunk le a fizikai LCP-re. Ezen utolsó szakasz mentén az integráláshoz csak a királis kondenzátumokra van szükség. Királis extrapolációra csak az utolsó szakasz mentén van szükség, hiszen ekkor jutunk el a fizikai tömeghez (és ekkor is csak a $T = 0$ rácson, hiszen $T > 0$ -n közvetlenül a fizikai tömegnél szimulálunk). Ily módon elkerüljük, hogy bizonytalan királis extrapolációkat kelljen végeznünk, akár a mértékhatásban, akár $\epsilon - 3p$ -ben. Természetesen ehhez a módszerhez a $T > 0$ szimulációkat is el kell végezni a magasabb tömegű LCP mentén.

A 3.3 táblázat mutatja a futtatási pontokat, melyeket úgy választottunk meg, hogy T_c környékén, ahol a nyomás leginkább változik, sűrűbben legyenek felvéve. Ezáltal minimalizálhatjuk az integrálás során elkövetett hibát.

A rácsállandótól való függés illusztrálása érdekében az $N_t = 4$ és 6 eredmé-

N_t	p/T^4	ϵ/T^4	s/T^3	c_s^2
4	9.12	27.36	36.48	1/3
6	7.86	23.58	31.44	1/3
∞	5.21	15.63	20.84	1/3

3.4. táblázat. A nyomás, energiasűrűség, entrópiasűrűség és hangsebesség végtelen hőmérsékletű, Stefan-Boltzmann limesze $N_t = 4$ és 6 rácson, valamint a kontinuum-ban.

nyeket mindig egy ábrán mutatjuk. A vezető rendű diszkretizációs hibák eltüntetése érdekében valamennyi mennyiségünket átskálázzuk úgy, hogy a végtelen hőmérsékletű viselkedésük megegyezzen a kontinuumbeli várakozással. Ehhez minden mennyiséget megszorozunk a hozzá tartozó végtelen hőmérsékletű Stefan-Boltzmann limeszek c_{kont}/c_{N_t} arányával. Itt c_{kont} a kontinuum, míg c_{N_t} az adott N_t -jű rácshoz tartozó Stefan-Boltzmann limeszt jelöli. A 3.4 táblázatban összegyűjtöttük a Stefan-Boltzmann limeszeket az egyes mennyiségekre.

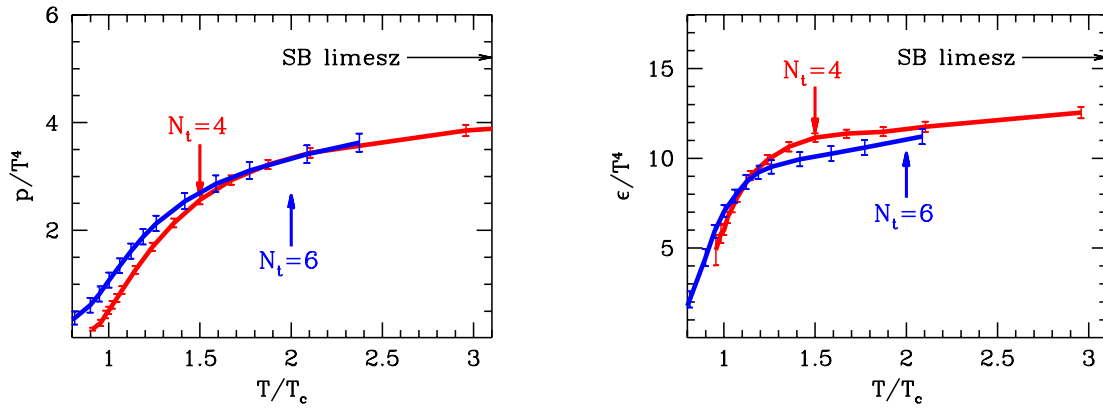
Mivel az eredmény a T_c -vel ellentétben ezúttal nem egy szám, hanem a $p(T)$ görbe (melyből aztán a többi mennyiség már könnyen számolható), így azt táblázatos formában is megadjuk. A 3.5 táblázatban láthatjuk a nyomást az összes szimulációs pontunkban. Az értékeket már beszoroztuk a c_{kont}/c_{N_t} szorzóval.

A 3.12 ábrán láthatjuk a nyomást és az energiasűrűséget a két rács felbontás mellett. A hőmérséklet skálát mindig az adott N_t mellett a ritka kvarkszám szuszceptibilitásból meghatározott T_c -vel normáltuk. Láthatjuk, hogy a két-két görbe egyik esetben sem mutat jó skálázást. Hasonló a helyzet a 3.13 ábrán látható entrópiasűrűséggel és hangsebességgel. Az adatok a nyomás esetén $\approx 30\%$, az energiasűrűség és az entrópiasűrűség esetében $\approx 20\%$ eltérést mutatnak $3T_c$ hőmérsékleten a Stefan-Boltzmann limeszhez képest. Ez arra utal, hogy még jóval az átmenet fölött is egy erősen kölcsönható kvark-gluon plazmával állunk szemben. Ezt megerősíti a 3.14 ábra, mely az $\epsilon - 3p$ kölcsönhatási mértéket mutatja. Ez még $3T_c$ hőmérsékleten is csak a maximum érték harmadára esik le.

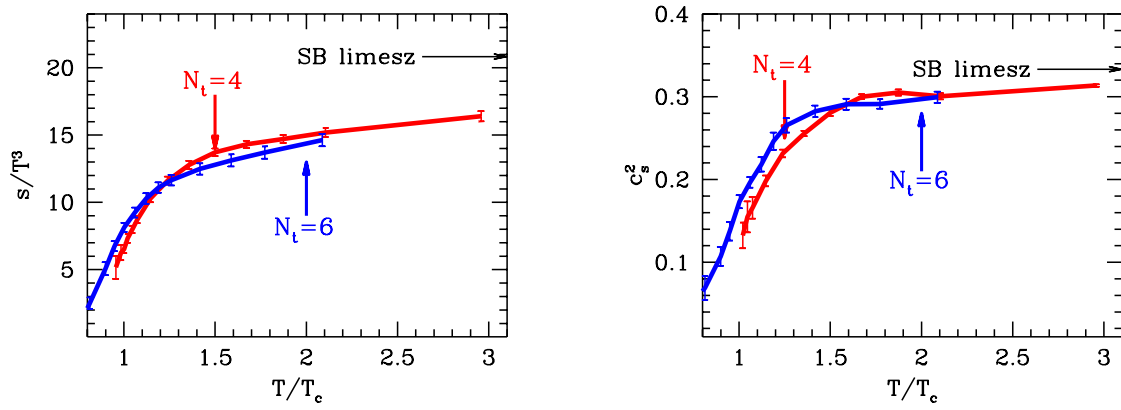
A megadott görbék segítségével már megkísérelhetjük a kontinuum extrapolációt. Mivel azonban a skálázás még nem tökéletes, megállapíthatjuk, hogy a megbízható kontinuum extrapoláció elvégzéséhez legalább még egy rács felbontásra szükség van, ami a korábban említett nehézségek (renormálás és nagy $T = 0$ rácok szükségessége) miatt nem könnyű feladat.

β	T/T_c	p/T^4	β	T/T_c	p/T^4
3.000	0.90	0.07(0.01)	3.450	0.80	0.05(0.08)
3.150	0.95	0.19(0.04)	3.500	0.87	0.15(0.08)
3.250	0.98	0.34(0.06)	3.550	0.96	0.39(0.08)
3.275	0.99	0.42(0.06)	3.575	1.02	0.60(0.08)
3.300	1.01	0.52(0.06)	3.600	1.07	0.86(0.08)
3.325	1.04	0.65(0.06)	3.625	1.14	1.12(0.09)
3.350	1.06	0.79(0.05)	3.650	1.20	1.40(0.09)
3.400	1.14	1.16(0.06)	3.675	1.28	1.66(0.10)
3.450	1.23	1.59(0.06)	3.700	1.35	1.91(0.10)
3.500	1.34	2.04(0.07)	3.750	1.52	2.32(0.10)
3.550	1.49	2.47(0.07)	3.800	1.70	2.65(0.11)
3.600	1.66	2.83(0.07)	3.850	1.90	2.89(0.11)
3.650	1.86	3.12(0.07)	3.930	2.24	3.19(0.11)
3.700	2.09	3.34(0.07)	4.000	2.55	3.41(0.11)
3.850	2.93	3.75(0.09)			
4.000	3.93	3.98(0.09)			

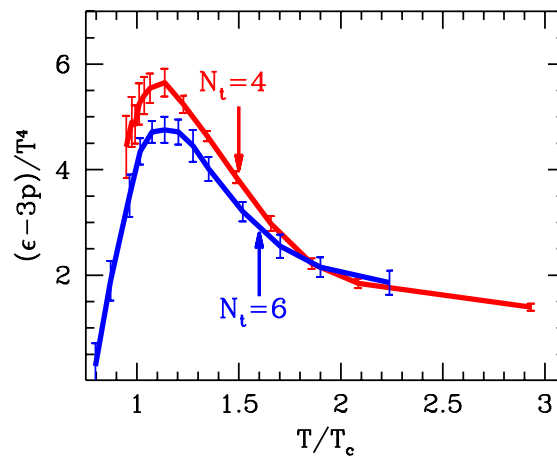
3.5. táblázat. A nyomás értékei az egyes szimulációs pontokban. A közvetlenül kapott értékeket megszoroztuk a c_{kont}/c_{N_t} szorzóval. Az első három oszlop az $N_t = 4$, míg a másik három az $N_t = 6$ eredményeket tartalmazza.



3.12. ábra. A nyomás (bal oldal) és az energiasűrűség (jobb oldal) a hőmérséklet függvényében. A piros görbék az $N_t = 4$, a kékek az $N_t = 6$ eredményt ábrázolják.



3.13. ábra. Az entrópiasűrűség (bal oldal) és a hangsebesség négyzete (jobb oldal) a hőmérséklet függvényében. A piros görbék ezúttal is az $N_t = 4$, míg a kékek az $N_t = 6$ eredményt mutatják.



3.14. ábra. Az $\epsilon - 3p$ kölcsönhatási mérték a hőmérséklet függvényében $N_t = 4$ (piros görbe) és $N_t = 6$ (kék görbe) rácson.

4. fejezet

Véges kémiai potenciál

A dolgozat hátralevő részében a nemnulla barionsűrűség vizsgálatával foglalkozunk. E témakör tanulmányozása rács térelmélet segítségével a korábban már röviden említett és hamarosan részletezendő előjel probléma miatt nagyon nehéz. Közvetlen rács szimulációk nem lehetségesek. Korábban egyetlen olyan rács módszer sem létezett, mely megbízható eredményeket adott volna. A legjelentősebb próbálkozás a Glasgow-módszer [67], mely nulla kémiai potenciálon generált konfigurációkból próbál információt nyerni a véges kémiai potenciál esetére. A fázisdiagramot azonban nem sikerült meghatározni, még egészen kicsi, 4^4 -es rácson, több millió konfiguráció generálásával sem. Ennek okát később részletesen elemezzük. A további munkák általában valamilyen effektív elméletet oldanak meg a QCD helyett, mely természetesen nem tekinthető végleges megoldásnak. Ezekkel a modellekkel a továbbiakban nem foglalkozunk.

A következőkben röviden áttekintjük, hogyan lehet a kémiai potenciált a rácson bevezetni és szemléltetjük az előjel problémát. Ezután ismertetünk egy új módszert, a többparaméteres átsúlyozást, melynek segítségével sikerült a fázisdiagram, a kritikus pont és az állapotegyenlet meghatározása. Ezeket az eredményeket részletesen ismertetjük.

Véges kémiai potenciál esetén a célunk még nem a kontinuum limesz meghatározása, hanem az, hogy egyáltalán rácson tudjuk vizsgálni ezeket a problémákat. Ezért a továbbiakban végig a (2.5) Wilson mértékhatást és a (2.9) javíthatatlan staggered hatást használjuk $N_t = 4$ rácson. Ezeknek az analíziseknek a kiterjesztése javított hatás használatával finomabb rácokra további kutatások feladata lesz.

4.1. A kémiai potenciál a rácson

Kontinuum termodinamikában a nagykanonikus állapotösszegben a kémiai potenciált egy μN tag segítségével vezethetjük be, ahol N a részecskeszám. QCD-

ben euklideszi téridőn a részecskesűrűség a $\bar{\psi}\gamma_4\psi$ kifejezéssel arányos, tehát a kézenfekvő megoldás az lenne, ha a hatásához hozzáadnánk egy $\mu \sum_x \bar{\psi}\gamma_4\psi$ tagot. Belátható azonban, hogy az így bevezetett kémiai potenciál nemkívánatos kvadrátikus divergenciákhoz vezet. Észrevehetjük viszont, hogy a $\mu \sum_x \bar{\psi}\gamma_4\psi$ tag épp egy tisztán képzetes vektorpotenciál euklideszi idő irányú komponensével való kölcsönhatásnak felel meg. Mivel a mértéktereket a rácson a linkekhez rendeltük, így ezen analógia alapján a kémiai potenciált is célszerű a linkekhez rendelni [68]. Ezek alapján már lényegében egyértelmű a kémiai potenciál bevezetése: a pozitív időirányú $U_{x;4}$ linkeket $e^{a\mu}$ -vel, míg az $U_{x;4}^\dagger$ adjungáltjaikat (ezek felelnek meg a negatív irányú linkeknek) $e^{-a\mu}$ -vel kell megszoroznunk a fermion hatásban. A (2.9) staggered hatás így kémiai potenciál jelenlétében a következőképpen módosul:

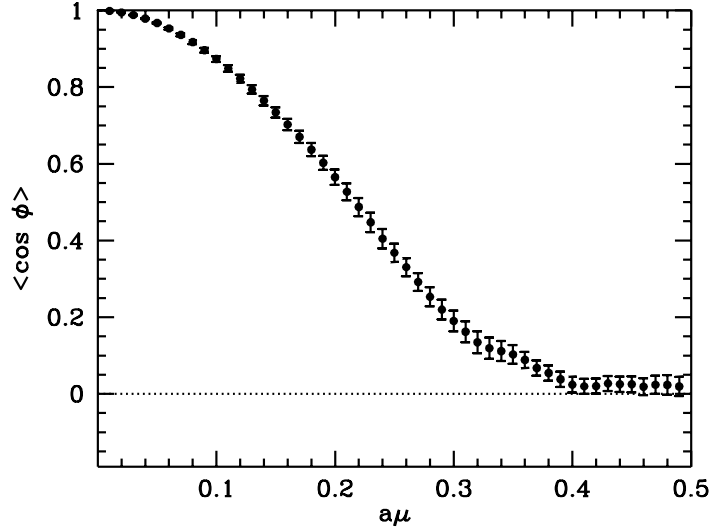
$$S_{f,\text{staggered}}(\mu) = \sum_x \left[am\bar{\chi}\chi + \frac{1}{2} \sum_{\nu=1\dots 3} \alpha_{x;\nu} \left(\bar{\chi}_x U_{x;\nu} \chi_{x+a\hat{\nu}} - \bar{\chi}_x U_{x-a\hat{\nu};\nu}^\dagger \chi_{x-a\hat{\nu}} \right) + \alpha_{x;4} \left(\bar{\chi}_x U_{x;4} e^{a\mu} \chi_{x+a\hat{4}} - \bar{\chi}_x U_{x-a\hat{4};4}^\dagger e^{-a\mu} \chi_{x-a\hat{4}} \right) \right]. \quad (4.1)$$

Természetesen több kvark íz esetén minden kvark térhez külön kell hozzárendelni a kémiai potenciált; ezek akár különbözőek is lehetnek. A következőkben az u, d könnyű kvarkokhoz azonos μ -t rendelünk, míg a ritka kvark kémiai potenciálját nullának választjuk. Ez a nehézion ütközések leírásához ésszerű választás, ugyanis a kezdeti állapotok ritkasága nulla, az ütközés során pedig (a gyenge folyamatokat leszámítva) ritka kvarkok csak antikvarkkal együtt keletkezhetnek, nem változtatva ezáltal a teljes ritkaságot. A könnyű kvarkokból felépített barionokhoz rendelhető μ_B barionikus kémiai potenciál ez esetben a kvark kémiai potenciál háromszorosa.

Szokás még úgynevezett izospin kémiai potenciált is bevezetni. Ekkor az u és d kvarkokhoz ellentétes előjelű μ -t használunk. E választás legnagyobb előnye az, hogy a következőkben ismertetett előjel probléma ez esetben nem lép fel. A továbbiakban az izospin kémiai potenciállal nem foglalkozunk.

4.2. Az előjel probléma

A 2.4 alfejezetben láttuk, hogy valamennyi ma ismeretes algoritmusnak előfeltevése, hogy a fermion determináns pozitív valós szám legyen. Ezt nulla kémiai potenciál esetén a fermion mátrix γ_5 hermiticitása garantálja. Sajnos ez véges μ -re nem teljesül, ezért a fermion determináns komplex értékeket is felvehet. Az állapotösszegnek és a megfigyelhető mennyiségek várható értékeinek valósnak kell lenniük, ezért vehetjük a Z kiszámításához használt integrandus valós részét: $\text{Re det } M e^{-S_g}$ -t. Ennek pozitív előjelét azonban semmi nem garantálja, különböző konfigurációkra különböző lehet. Ezt nevezzük előjel problémának.



4.1. ábra. $\cos \phi$ várható értéke $a\mu$ függvényében, ahol ϕ a fermion determináns fázisa.

Az előjel problémának két komoly következménye van. A súlyosabb, hogy nem tudunk fontossági mintavételezéssel konfigurációkat generálni, hiszen negatív értékeket is felvevő függvényt nem lehet valószínűség eloszlásként értelmezni. A másik nehézség a váltakozó előjelekből adódó kiejtésekkel kapcsolatos. Még ha sikerül is valamilyen pozitív eloszlásfüggvény segítségével konfigurációkat generálnunk, ezen konfigurációkon $\text{Re det } M e^{-S_g}$ előjele váltakozik, így az átlag kiszámításakor nagy kiejtések lesznek, melyek jelentősen rontják a numerikus pontosságot.

Az utóbbi probléma szemléltetése céljából írjuk át a determinánst

$$\det M = |\det M| e^{i\phi} \quad (4.2)$$

alakba, és vizsgáljuk meg egy konfiguráció halmazon a fázis oszcillációjának mértékét μ függvényében. Ehhez a valós részben szereplő $\cos \phi$ -t számítjuk ki minden konfiguráción, majd ezeket átlagoljuk. A 4.1 ábrán látható az eredmény. A konfigurációkat $\mu = 0$ -n generáltuk $8^3 \cdot 4$ rácson $am_{ud} = 0.025$ és $am_s = 0.2$ kvarktömegekkel a $\beta = 5.1991$ csatolás értéknél, mely a $\mu = 0$ átmeneti pontnak felel meg.

Láthatjuk, hogy kis μ értékekre $\cos \phi$ várható értéke jól meghatározható, míg $a\mu \gtrsim 0.4$ esetén a fázis oszcillációja miatt $\cos \phi$ már statisztikailag nem különböztethető meg a nullától: az előjel probléma súlyossá válik.

4.3. Többparaméteres átsúlyozás

A determináns fázisának kis μ értékek esetén tapasztalt viselkedése lehetőséget ad arra, hogy ebben a tartományban egy jól megválasztott konfiguráció halmazon olyan eredményeket kaphassunk, melyet az előjelek kiejtése még nem veszélyeztet. A kérdés természetesen az, hogy hogyan válasszuk meg a konfigurációkat, tudva, hogy a fontossági mintavételezés közvetlenül nem működik. A legkézenfekvőbb lehetőség, hogy továbbra is fontossági mintavételezést használunk, azaz a konfigurációkat e^{-S_E} eloszlással generáljuk, ám valamilyen más hatással. Ezen belül is az a legegyszerűbb, ha a hatás alakját nem változtatjuk, csak a paraméterek értékét. Ennek megfelelően a (2.12) állapotösszeget átírhatjuk a következő alakra:

$$\begin{aligned} Z &= \int \mathcal{D}U \det M(m, \mu, U) e^{-S_g(\beta, U)} = \\ &= \int \mathcal{D}U \det M(m_0, \mu_0, U) e^{-S_g(\beta_0, U)} \times \\ &\quad \left\{ \frac{\det M(m, \mu, U)}{\det M(m_0, \mu_0, U)} e^{-S_g(\beta, U) + S_g(\beta_0, U)} \right\}. \end{aligned} \quad (4.3)$$

A második sorban szereplő integrandust –mely épp a hatás az eredetiektől különböző (β_0, m_0, μ_0) paramétereknél– használjuk a fontossági mintavételezés során. Ezzel az eloszlással generáljuk a konfigurációkat. A harmadik sorban a kapcsos zárójelben levő kifejezést pedig megfigyelhető mennyiségként vesszük figyelembe. Úgy is tekinthetünk ezekre az értékekre, mint az (β_0, m_0, μ_0) paraméterekkel generált konfigurációk súlyai a (β, m, μ) paramétereknek megfelelő állapotösszegben. Jelöljük ezeket a súlyokat $w(U)$ -val¹:

$$w(U) = \frac{\det M(m, \mu, U)}{\det M(m_0, \mu_0, U)} e^{-S_g(\beta, U) + S_g(\beta_0, U)}, \quad (4.4)$$

és legyen $Z_0 = Z(\beta_0, m_0, \mu_0)$. Ekkor azonnal látható, hogy

$$\frac{Z}{Z_0} = \frac{\int \mathcal{D}U w(U) \det M(m_0, \mu_0, U) e^{-S_g(\beta_0, U)}}{\int \mathcal{D}U \det M(m_0, \mu_0, U) e^{-S_g(\beta_0, U)}} = \langle w \rangle_{(\beta_0, m_0, \mu_0)}. \quad (4.5)$$

A várható érték indexe jelzi, hogy mely paraméterek mellett értendő az átlagolás. Vegyünk ezek után egy $O(\beta, m, \mu)$ megfigyelhető mennyiséget. A paraméterektől való függést ezúttal expliciten kiírtuk. A mennyiség várható értéke:

$$\langle O \rangle_{(\beta, m, \mu)} = \frac{\int \mathcal{D}U O(\beta, m, \mu, U) \det M(m, \mu, U) e^{-S_g(\beta, U)}}{Z}. \quad (4.6)$$

¹Természetesen a w súlyok a két paraméter halmaztól is függnek, ezt azonban most az egyszerűség kedvéért nem írjuk ki

A törtet Z_0 -al bővítve, majd átalakítva:

$$\begin{aligned} \langle O \rangle_{(\beta, m, \mu)} &= \frac{Z_0 \int \mathcal{D}U w(U) O(\beta, m, \mu, U) \det M(m_0, \mu_0, U) e^{-S_g(\beta_0, U)}}{Z} = \\ &= \frac{\langle w \cdot O(\beta, m, \mu) \rangle_{(\beta_0, m_0, \mu_0)}}{\langle w \rangle_{(\beta_0, m_0, \mu_0)}}. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Tehát O kiszámításához a (β_0, m_0, μ_0) paraméterekkel generált konfigurációkon meghatározott értékeket a w súlyokkal súlyozva kell átlagolni. Fontos rámutatni azonban –ezért írtuk ki expliciten O függését a paraméterektől–, hogy O -t a (β, m, μ) paramétereknél kell kiértékelni. A most leírt módszert többparaméteres átsúlyozásnak nevezzük [69]. A módszer a Ferrenberg-Swendsen féle átsúlyozás [70, 71] általánosítása.

Természetesen a (β_0, m_0, μ_0) paramétereket úgy kell megválasztani, hogy ebben a pontban működjön a fontossági mintavételezés. Ehhez $\mu_0 = 0$ -t választunk a továbbiakban. Belátható azonban, hogy a pozitivitáshoz szükséges γ_5 hermiticitás tisztán képzetes μ esetén is teljesül, tehát ilyen kémiai potenciált is választhatunk.

Ugyan valamennyi megadott képlet egzakt, a módszer gyakorlati alkalmazhatósága azon múlik, hogy a $w(U)$ súlyok mennyire fluktuálnak. Két fontos nehézség léphet fel. Az első az úgynevezett átfedési probléma. Ezt a legegyszerűbb egy olyan példán bemutatni, amikor a determináns a cél (β, m, μ) paraméterek esetén is pozitív, azaz például $\mu = 0$.² A súlyok ebben az esetben mind pozitív valós számok. Mivel mindkét paraméter halmaz esetén lehetséges a fontossági mintavételezés, ezért mindkét esetben létezik a konfigurációk terének egy olyan kis részhalmaza, mely az adott paraméterek melletti fontos konfigurációkat tartalmazza. Ez azt jelenti, hogy egy realisztikus ideig tartó szimuláció során az összes generált konfiguráció ebből a halmazból kerül ki. Amennyiben a két halmaznak nincs, vagy kicsi az átfedése, akkor beszélünk átfedési problémáról. Ekkor ugyanis hiába rendelünk a (β_0, m_0, μ_0) mellett generált konfigurációkhoz új súlyokat, nem kaphatunk helyes eredményt, hiszen a (β, m, μ) paraméter értékek mellett fontos konfigurációk hiányoznak. Az átfedési probléma legkellemetlenebb tulajdonsága, hogy nehéz, néha lehetetlen észrevenni. Tekintsünk egy extrém példát, melyben a két paraméter halmazhoz tartozó fontos konfigurációk halmaza nagyon különböző (például más fázist írnak le). Ekkor véges sok konfigurációt generálva egyetlenegy sem lesz a (β, m, μ) paraméterek mellett fontosnak számítók között. A $w(U)$ súlyok hasonló nagyságrendűek lesznek, és látszólag jó eredményeket kapunk, kis statisztikus hibával. Ha növeljük a statisztikát, előfordulhat, hogy megjelenik egy

²Ilyen esetekben ritkábban alkalmazunk átsúlyozást, hiszen közvetlen szimuláció is lehetséges, de az átfedési probléma szemléltetésére kitűnően alkalmas.

konfiguráció, mely (β, m, μ) esetén fontos. Ebben a pillanatban ez a konfiguráció óriási súlyt kap a többihez képest, és ez fog dominálni minden eredményt, teljesen megváltoztatva a korábbiakat. Amíg azonban ez nem történik meg, nem vesszük észre, hogy átfedési problémával van dolgunk. Pontosan ez történik a Glasgow-módszer alkalmazása esetén.

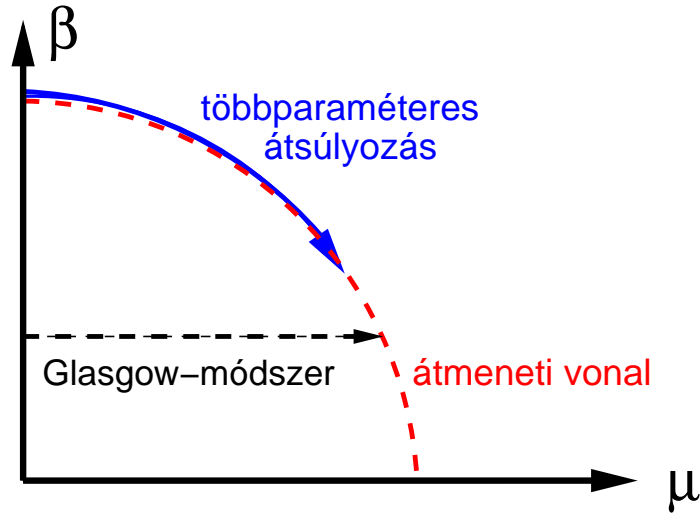
A másik nehézség, mely a többparaméteres átsúlyozás esetén felléphet a már ismertetett előjel probléma. A determináns fázisa teljes egészében a w súlyokban szerepel. Nagy μ esetén, mint láttuk, a kiejtések miatt már nem tudunk nullától statisztikailag megkülönböztethető értékeket mérni. Ekkor a (4.7) kifejezés 0/0 alakúvá válik és kezelhetetlen lesz. Azt várjuk, hogy ezt a jackknife hibaszámolás jól jelzi, ugyanis ez rész mintákon alapul és a kiejtések mértéke nagy mértékben függ attól, hogy mely rész mintát használjuk. Ezáltal nagy statisztikus hiba jelzi az előjel probléma felléptét.

Staggered fermionok esetén egy további problémával is szembesülünk. Az eddigi képletek a staggered formalizmusban négy kvark ízt írnak le. Kevesebb kvark ízt a már említett negyedik gyök trükkkel szokás kezelni. Ekkor azonban a w súlyokban megjelenik egy komplex szám tört hatványa, mely nem egyértelmű. Ezt a problémát a következő alfejezetben vizsgáljuk meg részletesen. Most a módszer szemléltetésére négy kvark ízt használunk.

Vizsgáljuk meg, hogyan célszerű adott (β, m, μ) mellett a (β_0, m_0, μ_0) szimulációs paramétereket megválasztani. Néha a kérdés fordítva merül föl: adott (β_0, m_0, μ_0) mellett generált konfigurációkból mely (β, m, μ) értékekre tudunk a legnagyobb biztonsággal átsúlyozni.

A már korábban említett Glasgow-módszer a többparaméteres átsúlyozás egy speciális esete a $\beta_0 = \beta$, $m_0 = m$ és $\mu_0 = 0$ választással. Látni fogjuk, hogy ez a választás a fázisdiagram meghatározásához nem szerencsés.

Már korábban említettük, hogy a pozitivitás érdekében $\mu_0 = 0$ -t használunk. A kvarktömegben az egyszerűség kedvéért nem végzünk átsúlyozást, így $m_0 = m$ választással élünk. Kézenfekvő lehetőség, hogy adott (β, m, μ) -höz úgy definiáljuk β_0 -t, hogy a $w(U)$ súlyok szórása minimális legyen. Ezt a definíciót fogjuk az állapotegyenlet meghatározásánál használni. Léteznek azonban esetek, amikor a fizikai intuíció egyszerűbb megoldást kínál. Ilyen a fázisgörbe meghatározása. Mivel a fázisátmeneti vonal mentén szeretnénk mennyiségeket meghatározni (melyekkel aztán definiáljuk a vonalat magát), vagyis (β, m, μ) ezen vonal mentén fog feküdni, így célszerű β_0 -t úgy megválasztani, hogy az fizikailag hasonló szituációhoz tartozzon. Ez a pont pedig a $\mu = 0$ QCD átmeneti pont. Fordítva: a $\mu = 0$ átmeneti ponthoz tartozó β_0 -nál generálva konfigurációkat azt várjuk, hogy az átsúlyozás a $\beta(\mu)$ fázisgörbe mentén lesz optimális, hiszen itt a leghasonlóbbak a fizikai körülmények.



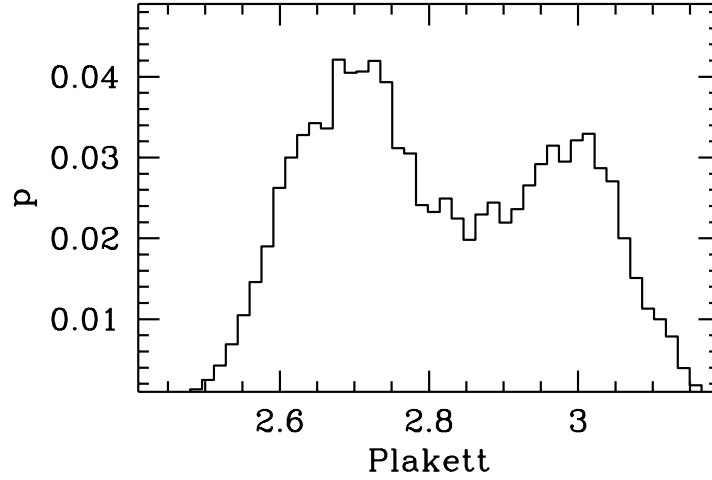
4.2. ábra. A többparaméteres átsúlyozás (kék görbe) összehasonlítása a Glasgow-módszerrel (fekete szaggatott vonal). Mivel a Glasgow-módszernél a hadronikus fázisban generáljuk a konfigurációkat, sokkal kevésbé tudjuk a $\mu > 0$ átmenetet leírni, mint a többparaméteres átsúlyozás átmeneti konfigurációival.

A 4.2 ábra illusztrálja a többparaméteres átsúlyozás előnyét a Glasgow-módszerrel szemben. A Glasgow-módszer alkalmazása során csak μ -ben történik átsúlyozás, így $\mu = 0$ -n automatikusan a hadronikus fázisban generálunk konfigurációkat. Ezek a konfigurációk lényegesen különböznek a fázisgörbe túloldalán levő kvark-gluon jellegű konfigurációktól, így nem meglepő, hogy az átsúlyozás kevés információt ad a fázishatárról. A többparaméteres átsúlyozás esetén a két fázis határán generáljuk a konfigurációkat. Így jóval nagyobb esélyünk van hasonló jellegű átmeneti pontokba eljutni az átsúlyozással.

4.3.1. Az $N_f = 4$ fázisátmenet $\mu > 0$ esetén

A leírtak illusztrálására vizsgáljuk a négy kvark ízt tartalmazó rendszert többparaméteres átsúlyozás segítségével. A tört hatványok elkerülése érdekében most négy ízt használunk. További előnye a négy íz használatának, hogy erősebb fázisátmenetet várunk, mint $2+1$ íz esetén, így jól láthatók a módszer előnyei. A csupasz kvarktömegeket $am = 0.05$ -nek választjuk és mindössze két kis rácsméretet (4^4 és $6^3 \cdot 4$ használunk. Első lépésben mindkét rácson megkeressük $\mu = 0$ -n azt a $\beta = \beta_c$ értéket ahol a fázisátmenet van. Ehhez a legegyszerűbb a

$$P = \frac{1}{3} \sum_{x, \mu < \nu} \text{ReTr} U_P(x; \mu \nu) \quad (4.8)$$



4.3. ábra. A plakett átlag eloszlása 4^4 rácson $\mu = 0$ és $\beta = 4.982$ esetén. A kétsúcsú eloszlás fázisátmenetre utal.

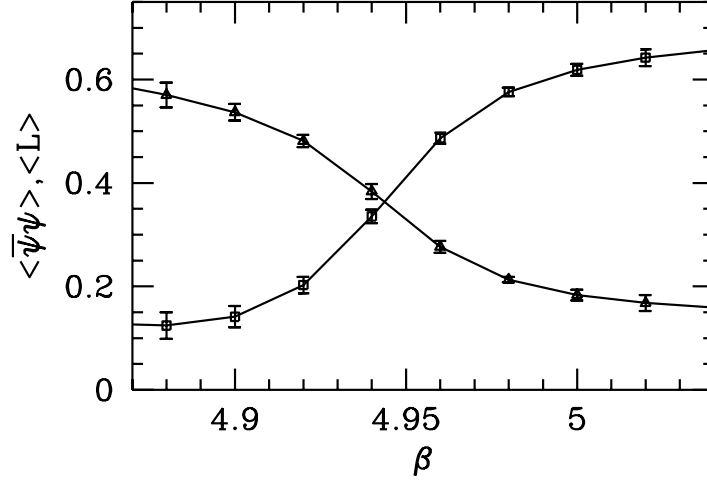
plakett átlag vizsgálata. Ez lényegében a Wilson mértékhatás. A 4^4 rácson β függvényében megmérve a plakett átlagot, $\beta = 4.982$ -nál ugrást tapasztalunk. A 4.3 ábra mutatja a plakett eloszlását ennél a β értéknél. A hisztogram csúcsai két jól megkülönböztethető fázist jeleznek. Ezek 2.7 és 3 körüli plakett értékeknek felelnek meg. Az ebben a pontban generált konfigurációk tehát vegyesen tartalmaznak konfigurációkat mindkét fázisból.

Alkalmazzuk a többparaméteres átsúlyozást ezekre a konfigurációkra. Legyen $a\mu = 0.3$ és határozzuk meg két fontos fizikai mennyiség, a királis kondenzátum és a Poljakov hurok értékét átsúlyozással néhány β értékre. A 4.4 ábrán láthatjuk az eredményt. Jól látható, hogy $\beta \approx 4.94$ -nél mindkét mennyiség gyorsan változik, ami arra utal, hogy $a\mu = 0.3$ -nál itt történik a fázisátmenet. A következőkben megismerkedünk a Lee-Yang zérusok módszerével; ennek segítségével pontosabban tudjuk definiálni az átmeneti pontot.

4.3.2. Az $N_f = 4$ fázisgörbe meghatározása Lee-Yang zérusok segítségével

A fázisátmenetek helyének és rendjének meghatározására jól használható a Lee és Yang által kidolgozott Lee-Yang zérusok módszere [72, 73]. Alkalmazhatóságának feltétele azonban, hogy vagy valódi fázisátmenet legyen, vagy nagyon gyors változással járó crossover. ³

³A $\mu = 0$ esetben, a 3 fejezetben használt javított rács hatással ez a feltétel nem teljesült, ezért használtunk más módszert az átmenet rendjének és T_c -nek a meghatározására.



4.4. ábra. A $a\mu = 0.3$ -re átsúlyozott Poljakov hurok (négyzetek) és királis kondenzátum (háromszögek) a β csatolás függvényében. Mindkét mennyiség jelzi a fázisátmenetet $\beta \approx 4.94$ környékén.

Tegyük fel, hogy rendszerünkben elsőrendű fázisátmenet valósul meg. Ekkor nagy V térfogaton az átmenet közelében két fázis egyszerre létezhet. Az állapotösszeg a

$$Z = e^{-\frac{V}{T}f_A} + e^{-\frac{V}{T}f_B} \quad (4.9)$$

alakba írható, ahol f_A és f_B a két fázis szabadenergiasűrűsége. Az átmeneti pontban $T = T_c$ és $f_A = f_B$. A β csatolás változtatásával a rendszert elhanyagolhatjuk az átmeneti pontból. Ha az átmeneti pontban $\beta = \beta_c$ és bevezetjük $\Delta\beta = \beta - \beta_c$ -t, akkor T és f_B sorbafejthető T_c , illetve f_A körül. Kis $\Delta\beta$ -ra:

$$T = T_c + c_1\Delta\beta + \mathcal{O}(\Delta\beta^2) \quad f_B = f_A + c_2\Delta\beta + \mathcal{O}(\Delta\beta^2) \quad (4.10)$$

valamilyen c_1 és c_2 konstans együtthatókkal. Ezeket a (4.9) állapotösszegbe beírva Z az alábbi alakra hozható:

$$Z = e^{-\frac{V}{T_c}f_A} (e^{aV\Delta\beta} + e^{bV\Delta\beta}), \quad (4.11)$$

ahol

$$a = \frac{f_A c_1}{T_c^2} \quad b = a - \frac{c_2}{T_c}. \quad (4.12)$$

Tovább alakítva:

$$Z = 2 \exp\left(-\frac{V}{T_c}f_A + \frac{a+b}{2}V\Delta\beta\right) \cosh\left(\frac{a-b}{2}V\Delta\beta\right). \quad (4.13)$$

Az első tényező nem lehet nulla, a második azonban igen, ha $\Delta\beta$ tisztán képzetes és:

$$\text{Im}\Delta\beta = \frac{2}{(a-b)V}(k + \frac{1}{2})\pi, \quad (4.14)$$

ahol k tetszőleges egész. Tehát nagy térfogatok esetén a $Z(\beta)$ függvény zérushelyekkel rendelkezik. Ezek a Lee-Yang zérusok. A zérusoknál $\text{Re}\beta = \beta_c$ és $\text{Im}\beta \propto 1/V$. Tehát megkeresve Z zérushelyeit, a valós rész az átmeneti pont definíciójaként használható, míg a képzetes rész $1/V$ skálázása jelzi az elsőrendű fázisátmenetet. A $V \rightarrow \infty$ limeszben a képzetes rész nullához tart. Így generálják a Lee-Yang zérusok a szabadenergia szingularitását a valós β_c -nél. Crossover esetén természetesen nincs szingularitás végtelen térfogaton sem, így a Lee-Yang zérusok nem érhetik el a valós tengelyt, képzetes részüknek véges értékhez kell tartaniuk. Numerikus vizsgálatokban általában a $k = 0$ zérust használjuk, ez van ugyanis legközelebb a valós tengelyhez, ami mentén a szimulációkat végezzük.

A Lee-Yang zérusok meghatározását átsúlyozással végezzük. A szimulációs β_0 érték közelében komplex β értékekre meghatározhatjuk Z/Z_0 értékét a (4.5) képlet alapján. Ehhez csupán a súlyokat kell összeadnunk. Első lépésben $\mu = 0$ -nál maradva Wilson hatás esetén a súlyok értéke:

$$w(U) = e^{-S_g(\beta) + S_g(\beta_0)} = e^{(\beta - \beta_0)P} \quad (4.15)$$

Tehát megmérve az U_i konfigurációkon a P_i plakett átlagokat, a Lee-Yang zérusok megkereséséhez a

$$\sum_i e^{(\beta - \beta_0)P_i} = 0 \quad (4.16)$$

egyenletet kell megoldanunk a komplex β síkon. A megoldás valós része fogja megadni az átmeneti pontot. A Lee-Yang zérusokat rögzített, véges μ esetén is megkereshetjük, ekkor a megoldandó egyenlet:

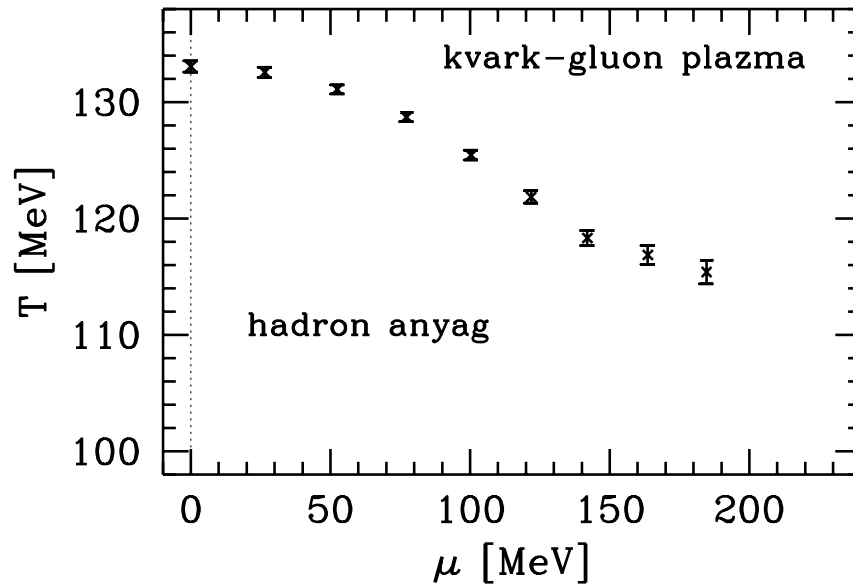
$$\sum_i \left(\frac{\det M(\mu)}{\det M(\mu = 0)} \right)_i e^{(\beta - \beta_0)P_i} = 0, \quad (4.17)$$

vagyis a $\det M(\mu)/\det M(\mu = 0)$ hányadosokat kell meghatároznunk az egyes konfigurációkon.

Az egyenlet megoldását úgy végezzük, hogy egy kezdeti β érték körül sorbafejtjük a bal oldalon álló kifejezést β -ban és megkeressük a közelítő Taylor-polinom zérushelyeit. A kezdeti β -hoz legközelebb levő zérushely jó közelítéssel egy keregett Lee-Yang zérus, de pontosítás céljából megismételhetjük az eljárást ebből a pontból indulva.

A négy kvark íz esetében $\mu = 0$ -nál generált konfigurációkon elvégeztük a leírt analízist. A valós tengelyhez legközelebbi, $k = 0$ -hoz tartozó Lee-Yang zérusokat

$a\mu$	$\text{Re}(\beta_{LY})$ (4^4 rács)	$\text{Im}(\beta_{LY})$ (4^4 rács)	$\text{Re}(\beta_{LY})$ ($6^3 \cdot 4$ rács)	$\text{Im}(\beta_{LY})$ ($6^3 \cdot 4$ rács)
0.	4.988(1)	0.0458(7)	5.040(2)	0.019(1)
0.05	4.987(1)	0.0458(7)	5.038(2)	0.019(1)
0.1	4.983(1)	0.0457(8)	5.033(2)	0.019(1)
0.15	4.977(1)	0.0456(8)	5.023(2)	0.018(1)
0.2	4.968(1)	0.0456(8)	5.009(2)	0.017(2)
0.25	4.955(2)	0.0460(9)	4.993(3)	0.016(2)
0.3	4.938(2)	0.0465(10)	4.975(3)	0.016(2)
0.35	4.924(3)	0.0430(20)	4.965(4)	0.016(4)
0.4	4.920(4)	0.0383(53)	4.959(4)	0.014(6)

4.1. táblázat. A Lee-Yang zérusok helyei 4^4 és $6^3 \cdot 4$ rácson.4.5. ábra. Az $N_f = 4$ fázisdiagram $N_t = 4$ rácson.

a 4.1 táblázat foglalja össze. A Lee-Yang zérusok mindvégig a fázisgörbét jelölik ki, így azok megkeresésével automatikusan a 4.2 ábrán illusztrált vonal mentén haladunk. A kisebb rácson 13000, míg a $6^3 \cdot 4$ méretű rácson 1200 független konfigurációt generáltunk. Ez nagyságrendekkel kevesebb, mint amennyivel a Glasgow módszer még eredménytelennek bizonyult.

Annak ellenére, hogy a 4^4 és $4^3 \cdot 6$ rácsozok nagyon kicsik, érdemes megadni a fázisgörbét fizikai egységekben is. Ehhez a rácsállandót kell meghatároznunk. A skálát a ρ mezon tömegével állítottuk be. Alacsony β értékek esetén erős csatolási kifejtéssel [74], míg nagyobb β -nál korábbi eredmények felhasználásával [75, 76] határoztuk meg m_ρ -t. Ezek alapján a rácsállandót az

$$a = 0.0021\beta^2 - 0.0244\beta + 0.0714 \text{ [MeV}^{-1}\text{]} \quad (4.18)$$

polinommal becsülhetjük.

A fizikai egységekben megadott fázisdiagramot láthatjuk a 4.5 ábrán. Fontos megjegyezni, hogy a ρ mezon tömege a $\beta \rightarrow 0$ erős csatolási limeszben korlátos, így $N_t = 4$ rácson a legkisebb elérhető hőmérséklet (ha m_ρ -val állítjuk be a skálát) körülbelül 100 MeV. Ennek ismeretében nem meglepő, hogy az ábrán látható görbének kicsi a görbülete, a hőmérséklet nem esik 110 MeV alá.

4.3.3. $N_f = 2 + 1$ íz használata $\mu > 0$ esetén

Láttuk, hogy négynél kevesebb kvark ízt staggered fermionok esetén a negyedik gyök trükkkel tudunk leírni. Ez azt jelenti, hogy $\det M$ -et valamennyi korábbi formulában $(\det M)^{N_f/4}$ -el kell helyettesítenünk. $\mu = 0$ esetben tudjuk, hogy a γ_5 hermiticitás miatt az egy ízt leíró kontinuum Dirac-operátor determinánsa pozitív, így természetes, hogy mindig a pozitív gyököt választjuk a gyökvonás során. Mivel $\mu > 0$ esetén a fermion determináns komplex értékeket is felvehet (a kontinuumban is), a negyedik gyök nem egyértelmű. A szabad staggered fermion mátrix sajátértékei négyszeresen elfajultak. Ez az elfajultság jelzi, hogy valójában négy ízt ír le a modell. Ebben az esetben a determináns negyedik gyökét könnyű értelmezni: a sajátértékek szorzatába minden négyes csoportból csak egyet veszünk be. Belátható, hogy a kontinuum limeszhez közel is hasonló csoportosulást mutatnak a fermion mátrix sajátértékei. Így az egy-egy csoportban levő sajátértékek fázisát átlagolva, abszolút értékükből pedig negyedik gyököt vonva természetes módon kiválaszthatjuk $\det M$ megfelelő gyökét [77]. Sajnos a jelenleg használatos rácson ez a csoportosulás nehezen azonosítható. A probléma egy lehetséges megoldása, ha megköveteljük, hogy a

$$\left[\frac{\det M(\mu)}{\det M(\mu = 0)} \right]^{N_f/4} \quad (4.19)$$

függvény a valós μ tengely mentén folytonos legyen [78]. Látható, hogy mivel az előző definíció is folytonos függvényt ad, így azokon a rácson, amelyeken mindkét módszer működik, ugyanazt a gyököt adják.

A folytonosság megvalósítása nem egyszerű feladat, ugyanis a determinánsok fázisa gyorsan változhat μ növekedésével. Így nagyon sűrűn meg kellene mérnünk a determinánsokat ahhoz, hogy garantálni tudjuk a folytonosságot. Ehelyett az alábbi eljárással megadhatjuk a $\det M(\mu)$ függvény analitikus alakját, melynek segítségével a folytonosság könnyen garantálható.

Első lépésként végezzünk el egy temporális mértékrögzítést, azaz egy olyan mértéktranszformációt, melynek segítségével $U_{x;4} = 1$ minden $x_4 < N_t - 1$ esetén, vagyis –az utolsó idősíkot kivéve– minden időirányú link egységnyi. Ekkor a fermion mátrix az alábbi alakú:

$$M(a\mu) = \begin{pmatrix} B_1 & e^{a\mu} & 0 & \dots & e^{-a\mu}T^\dagger \\ -e^{-a\mu} & B_2 & e^{a\mu} & \dots & \\ 0 & -e^{-a\mu} & B_3 & \dots & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ -e^{a\mu}T & & & & \end{pmatrix}, \quad (4.20)$$

ahol az idő irányt írtuk ki. A mátrix elemei $3N_s^3 \times 3N_s^3$ méretű mátrixok (a 3 a színekből jön). A B_i mátrixok tartalmazzák az i . idősíkon a térirányú linkeket. A T mátrix az utolsó idősík időirányú linkjeiből áll. E tagok ellentétes előjele a fermionok időirányban antiperiodikus határfeltételének következménye. Szorozzuk meg a j . oszlopot $e^{-ja\mu}$ -vel és a j . sort $e^{ja\mu}$ -vel minden $j = 1 \dots N_t$ -re, valamint a bal szélső oszlopot (a teljes mátrixnak ez $3N_s^3$ oszlopa) vigyük át a jobb oldalra. Mivel N_s mindig páros, ezek a lépések a determinánst nem változtatják. A mátrix ezek után:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & e^{-N_t a\mu}T^\dagger & B_1 \\ B_2 & 1 & \dots & 0 & -1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots \\ & & & 1 & 0 \\ & & & B_{N_t} & -e^{N_t a\mu}T \end{pmatrix}. \quad (4.21)$$

A determinánst Gauss-eliminációval határozhatjuk meg. A főátlóban levő egység mátrixok segítségével könnyen eltüntethetjük az alattuk levő B_i mátrixokat. Egyszerűen $N_t - 2$ lépést tudunk elvégezni; ezek a következő alakú $6N_s^3 \times 6N_s^3$ méretű mátrixra vezetnek:

$$\begin{pmatrix} 1 + c_1 \cdot e^{-N_t a\mu} & c_2 \\ c_3 + c_4 \cdot e^{-N_t a\mu} & c_5 - e^{N_t a\mu}T \end{pmatrix}, \quad (4.22)$$

ahol a c_i mátrixok csak a B_i mátrixok függvényei, μ -tól nem függenek. Az első oszlopot szorozzuk meg -1 -gyel, a másodikat pedig T^\dagger -tel. Mivel T csupa unitér mátrixot tartalmaz, a determináns ezúttal sem változik. Egy utolsó Gauss-eliminációs lépés után (a második sorból levonjuk az első c_3 -szorosát) az alábbi mátrixra jutunk:

$$\begin{pmatrix} e^{-N_t a \mu}(-c_1 - e^{N_t a \mu}) & c_2 T^\dagger \\ e^{-N_t a \mu}(c_3 c_1 - c_4) & (c_5 - c_3 c_2) T^\dagger - e^{N_t a \mu} \end{pmatrix}. \quad (4.23)$$

A determináns így

$$\det M(a\mu) = e^{-3N_s^3 N_t a \mu} \det(P - e^{N_t a \mu}) \quad (4.24)$$

alakba írható, ahol

$$P = \begin{pmatrix} -c_1 & c_2 T^\dagger \\ c_3 c_1 - c_4 & (c_5 - c_3 c_2) T^\dagger \end{pmatrix}. \quad (4.25)$$

Ez a P mátrix karakterisztikus polinomjával arányos. Így P sajátértékeinek meghatározása után $\det M(\mu)$ tetszőleges μ -re megadható analitikus alakban:

$$\det M(a\mu) = e^{-3N_s^3 N_t a \mu} \prod_{i=1}^{6N_s^3} (e^{N_t a \mu} - \lambda_i), \quad (4.26)$$

ahol λ_i a P mátrix sajátértékei. A sajátértékprobléma megoldása $\mathcal{O}(N_s^9)$ műveletet igényel. Az eredeti determináns közvetlen kiszámításához $\mathcal{O}(N_s^9 N_t^3)$ művelet szükséges. Tehát nemcsak a $\det M(\mu)$ függvényt sikerült analitikus alakban megadni, hanem a mátrix ritkaságát kihasználva a műveletek számának skálázásán is javítottunk.

4.4. A QCD kritikus pontja

A QCD fázisdiagramjának talán legérdekesebb pontja a kritikus pont. Láttuk, hogy $\mu = 0$ -n az átmenet crossover. Négy fermion kölcsönhatást tartalmazó Nambu-Jona-Lasinio típusú effektív modellek nagy kémiai potenciál és alacsony hőmérséklet esetén elsőrendű átmenetet jósolnak [9]. Ez azt jelenti, hogy az elsőrendű és a crossover tartomány valahol a fázisgörbe mentén találkozik. Ez a QCD kritikus végpontja. (A végpont kifejezés arra utal, hogy itt ér véget az elsőrendű átmenet.) Ebben a pontban (legalább egy ilyen pontnak kell léteznie, ha nagy μ -nél valóban elsőrendű átmenet van) másodrendű fázisátmenet valósul meg. A többparaméteres átsúlyozás –ahogy azt négy íz esetén már láttuk is– lehetőséget

nyújt a fázisgörbe meghatározására a Lee-Yang zérusok segítségével. A Lee-Yang zérusok képzetes részének térfogatfüggése megadja az átmenet rendjét. A kritikus pont megkeresése három lépésből áll.

Először megkeressük a valós tengelyhez legközelebbi Lee-Yang zérusokat a komplex β síkon több μ értéknél. Az átsúlyozáshoz szükséges determinánsok meghatározásához a (4.26) képletet használjuk. Ezáltal tetszőlegesen sűrűn vehetjük fel μ értékeit, valamint a 2+1 kvark íz kezelése sem probléma. A Lee-Yang zérusok valós része kijelöli a fázisgörbét a β - μ síkon. Ezt az analízist több különböző térfogaton is elvégezzük, majd a valós részek végtelen térfogati extrapolációja adja meg a fázisgörbét a termodinamikai limeszben.

A második lépésben valamennyi μ értéknél megvizsgáljuk a Lee-Yang zérusok képzetes részének térfogatfüggését. Az $\text{Im}\beta_{LY}$ értékeket az

$$\text{Im}\beta_{LY}(V) = \text{Im}\beta_{LY}^\infty + c\frac{1}{V} \quad (4.27)$$

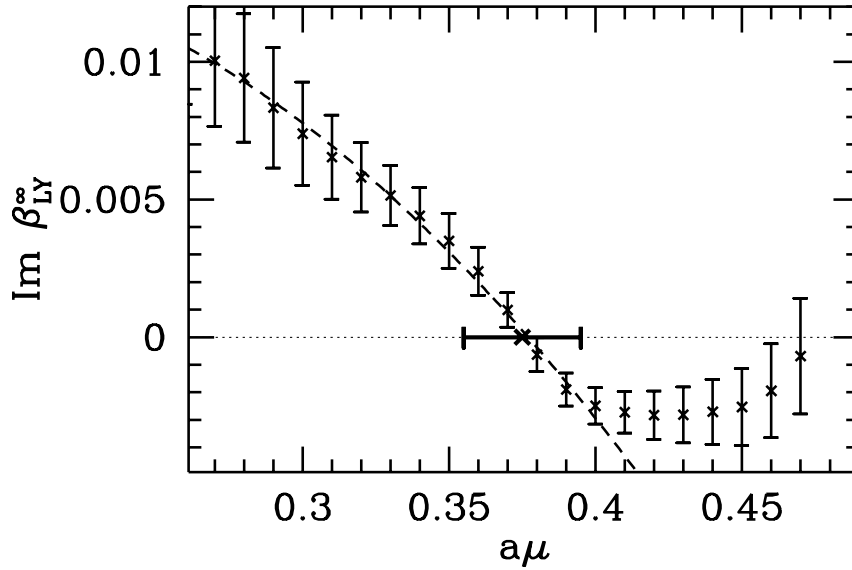
függvényalak segítségével extrapoláljuk a termodinamikai limeszbe. Láttuk, hogy elsőrendű fázisátmenetnél a képzetes rész $1/V$ -vel arányos, tehát ekkor $\text{Im}\beta_{LY}^\infty = 0$. Crossover esetén azonban véges értéket kapunk, mivel a Lee-Yang zérusok nem húzódnak rá a valós tengelyre. Az $\text{Im}\beta_{LY}^\infty(\mu)$ függvény tehát meghatározza az átmenet rendjét.

A harmadik lépésben a fázisgörbét és a kritikus pontot fizikai egységekben is megadjuk. Ehhez a rácsállandót kell meghatároznunk. Ez, ahogy korábban is $T = 0$ szimulációk segítségével lehetséges. Az r_0 és m_ρ értékét használjuk a rácsállandó meghatározásához.

$a\mu$	0.1	0.2	0.3	0.4
$\text{Re}(\beta_{LY}); N_s = 4$	5.151(1)	5.141(1)	5.127(2)	5.121(5)
$10^2\text{Im}(\beta_{LY})$	5.56(8)	5.50(9)	5.42(15)	5.56(38)
$\text{Re}(\beta_{LY}); N_s = 6$	5.193(1)	5.174(1)	5.152(3)	5.143(7)
$10^2\cdot\text{Im}(\beta_{LY})$	2.66(6)	2.54(9)	2.19(31)	1.82(39)
$\text{Re}(\beta_{LY}); N_s = 8$	5.193(1)	5.172(1)	5.159(1)	5.140(1)
$10^2\cdot\text{Im}(\beta_{LY})$	1.38(6)	1.32(17)	1.31(18)	0.48(7)
$\text{Re}(\beta_{LY}); N_s \rightarrow \infty$	5.201(1)	5.178(1)	5.162(2)	5.143(2)
$10^2\cdot\text{Im}(\beta_{LY})$	1.02(6)	1.12(11)	0.74(19)	-0.25(10)

4.2. táblázat. A Lee-Yang zérusok helye négy $a\mu$ értéknél $N_s = 4, 6$ és 8 rácson, valamint a termodinamikai limeszben 230 MeV-es piontömegnél.

A teljes analízist két különböző könnyű kvarktömegnél végeztük el. Az első, régebbi munkában [78] a fizikainál körülbelül háromszor nagyobb kvarktömeget



4.6. ábra. A Lee-Yang zérusok képzetes részének termodinamikai limesze $a\mu$ függvényében 230 MeV-es piontömegnél.

használtunk, ez 230 MeV-es piontömegnek felel meg. A csupasz kvarktömegek értéke ebben az esetben $am_{ud} = 0.025$ és $am_s = 0.2$. A szimulációkat három különböző rácsméretnél végeztük, ezek mérete 4^4 , $6^3 \cdot 4$ és $8^3 \cdot 4$ volt. A térfogat nyolcszorosára nőtt. A konfigurációkat mindhárom térfogaton a $\mu = 0$ átmeneti pontban generáltuk. A három térfogaton rendre 14000, 3600 és 840 független konfigurációt generáltunk, ezeket használtuk az átsúlyozáshoz. A 4.2 táblázatban láthatjuk a Lee-Yang zérusok helyét néhány μ értéknél. A képzetes részek $V \rightarrow \infty$ extrapolációjával kapott $\text{Im}\beta_{LY}^\infty$ -t ábrázoltuk $a\mu$ függvényében a 4.6 ábrán. Megállapíthatjuk, hogy alacsony μ értékekre $\text{Im}\beta_{LY}^\infty$ pozitív, azaz az átmenet crossover. A kémiai potenciál növekedésével $\text{Im}\beta_{LY}^\infty$ értéke csökken, majd nullává válik, ami az elsőrendű fázisátmenet megjelenését jelzi. A pontok némileg „túllőnek” a nullán. Ez a jelenség a viszonylag kis térfogatok használatával magyarázható, már korábban is megfigyelték például az elektrogyenge fázisátmenet vizsgálatánál [79]. Leolvashatjuk a kritikus végpont helyét dimenziótlan egységekben: $a\mu_E = 0.375(20)$.

A skála beállításához két β értéknél $10^3 \cdot 16$ méretű rácson meghatároztuk a pion és a ρ mezon tömegét, valamint az r_0 Sommer paramétert és a σ húrfezsültséget. Az eredményeket a 4.3 táblázat tartalmazza. Közbülső β értékekre lineárisan interpoláltunk. A ráczállandó beállításához a/r_0 és am_ρ súlyozott átlagát használtuk, súlyként a statisztikus hibák négyzetének inverzei szolgáltak. A 4.7 ábrán láthatjuk a fizikai egységekben megadott fázisdiagramot. Az átmenet

β	am_π	am_ρ	r_0/a	$a\sqrt{\sigma}$
5.208	0.393(2)	1.22(2)	1.87(3)	0.58(7)
5.164	0.393(2)	1.28(3)	1.76(5)	0.75(5)

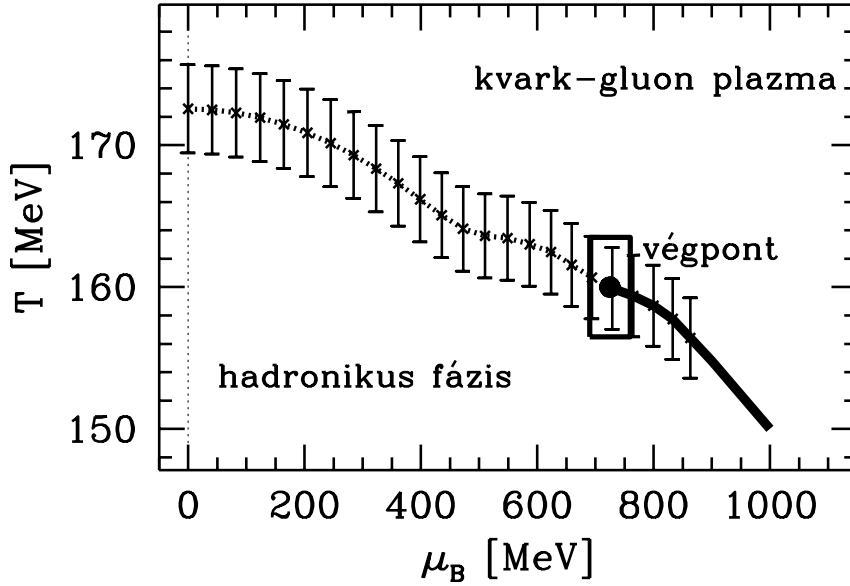
4.3. táblázat. A $T = 0$ szimulációk eredménye két β értéknél.

hőmérsékletét a $\mu_B = 3\mu$ barionikus kémiai potenciál függvényében ábrázoltuk. A kritikus pont $T_E = 160 \pm 3.5$ MeV hőmérsékletnél és $\mu_E = 725 \pm 35$ MeV barionikus kémiai potenciálnál helyezkedik el. Ne feledjük, hogy ez az eredmény 230 MeV-es piontömegnél, $N_t = 4$ rácson született, anélkül, hogy elvégeztük volna a kontinuum extrapolációt.

Mivel a $\mu = 0$ fázisátmenet rendje érzékeny a kvarktömegekre, a kritikus pont helye is változhat, ha csökkentjük a kvarktömegeket. Ezért nagyon fontos, hogy azok fizikai értékénél is meghatározzuk a kritikus pont helyét [80]. Az analízis lépései ugyanazok, mint a nagyobb kvarktömeg esetén. A 4.3 táblázat adatai alapján megbecsülhető, hogy milyen am_{ud} értéket kell választanunk a fizikai piontömeg eléréséhez. Ez alapján ezúttal $am_{ud} = 0.0092$ és $am_s = 0.25$ értékeket használunk (a korábbihoz képest valamivel nagyobb ritka kvarktömeg a kaon tömegének fizikai értéken tartásához kell). Ahogy a 2.4 alfejezetben láttuk, kis kvarktömegek használata rendkívül számítógépigényes. Ez az oka annak, hogy nem közvetlenül a fizikai tömegekkel végeztük az első analízist.

A korábbi vizsgálatunknak egy másik pontján is javítunk: ezúttal nagyobb térfogatokat használunk, a rácok mérete $6^3 \cdot 4$, $8^3 \cdot 4$, $10^3 \cdot 4$, $12^3 \cdot 4$. Mivel a determináns meghatározásához szükséges diagonalizáció $\mathcal{O}(N_s^9)$ műveletet igényel, így a térfogatok ilyen mértékű növelése is jelentősen megnöveli a számítógépigényt. Ebből, illetve a fizikai kvarktömeg használatából adódik, hogy összesen 140-szer több gépidőt igényel ez az analízis, mint a korábbi.

A Lee-Yang zérusok helyeit a 4.4 táblázat mutatja. A $V \rightarrow \infty$ extrapolációt ezúttal is $1/V$ -ben lineáris függvénnyel végeztük. A 4.8 ábrán láthatjuk $\text{Im}\beta_{LY}^\infty$ értékét $a\mu$ függvényében. Az ábráról leolvasható, hogy kis μ értékek esetén $\text{Im}\beta_{LY}^\infty$ értéke egyértelműen nem nulla, azaz az átmenet crossover. μ -t növelve $\text{Im}\beta_{LY}^\infty$ eleinte nem változik, aztán csökkenni kezd és végül nullával konisztens lesz. Ezúttal nincs túllövés, az érték nagyobb μ értékekre is nullával konisztens marad. Ez a korábbinál nagyobb térfogatok használatának köszönhető. A kritikus végpont helye rácsegrészekben: $a\mu_E = 0.1825(75)$. Most négy térfogatunk van, ezért megtehetjük, hogy kevesebb térfogatot használunk az extrapolációhoz, és megvizsgáljuk, hogyan változik a végpont helye. A legkisebb és legnagyobb három térfogatot használva azt tapasztaltuk, hogy $a\mu_E$ értéke csak a statisztikus



4.7. ábra. A fázisdiagram fizikai egységekben $N_f = 2 + 1$ kvark íz esetén 230 MeV-es piontömegnél. A szaggatott vonal a crossover tartományt jelzi, a folytonos vonal az elsőrendű fázisátmenetet. A kettőt elválasztó kritikus végpontot és annak bizonytalanságát a négyzet mutatja.

hibán belül változik. Ez azt jelzi, hogy az extrapolációhoz használt térfogatok elegendően nagyok, $a\mu_E$ értéke számottevő térfogatfüggő bizonytalanságot már nem tartalmaz.

Az utolsó lépés ismét a rácsállandó meghatározása. Mivel $T = 0$ szimulációkban nehéz a fizikai kvarktömeg használata, így három, valamivel nagyobb kvarktömeg mellett generáltunk konfigurációkat. Mindhárom kvarktömegnél meghatároztuk a pion, kaon és ρ mezonok tömegét, valamint r_0/a értékét. A fizikai kvarktömeghez királis extrapoláció segítségével jutottunk el. A királis perturbációs számítás vezető rendű összefüggéseinek megfelelően am_π^2 , am_K^2 , am_ρ és r_0/a értékét a kvarktömeg lineáris függvényével illesztettük (a pion és kaon esetében konstans nélkül). Az extrapoláció után az m_π/m_ρ arány 0.188(2)-nek, míg az m_K/m_ρ arány 0.267(1)-nek adódott. A megfelelő kísérleti arányok 0.179 illetve 0.277, tehát jó közelítéssel sikerült a fizikai kvarktömegeket eltalálnunk. A rácsállandót ezúttal is am_ρ és a/r_0 súlyozott átlagából határoztuk meg. A fizikai egységekben megadott fázisdiagram a 4.9 ábrán látható. A kritikus végpont $T_E = 162 \pm 2$ MeV hőmérsékletnél és $\mu_E = 360 \pm 40$ MeV barionikus kémiai potenciálnál található. μ_E értéke lényegesen alacsonyabb, mint nagyobb kvarktömegeknél. Ez megfelel a várakozásainknak. Csökkenő kvarktömegek esetén erősödik a $\mu = 0$ átmenet, és bár még crossover marad, a kritikus pont közelebb

$Re(\mu)$	0.04	0.08	0.12	0.16	0.20
$Re(\beta_0); L_s = 6$	5.1863(9)	5.1839(9)	5.1800(9)	5.1749(11)	5.1713(14)
$10^2 Im(\beta_0)$	2.39(6)	2.39(6)	2.41(8)	2.41(13)	2.26(22)
$Re(\beta_0); L_s = 8$	5.1886(4)	5.1858(5)	5.1811(5)	5.1753(7)	5.1710(16)
$10^2 Im(\beta_0)$	1.32(2)	1.33(3)	1.33(3)	1.28(5)	0.98(12)
$Re(\beta_0); L_s = 10$	5.1892(3)	5.1865(3)	5.1821(3)	5.1758(8)	5.1751(11)
$10^3 Im(\beta_0)$	7.27(14)	7.26(15)	7.33(22)	6.44(74)	5.29(76)
$Re(\beta_0); L_s = 12$	5.1888(2)	5.1861(2)	5.1817(3)	5.1768(4)	5.1739(6)
$10^3 Im(\beta_0)$	4.95(12)	4.95(13)	4.88(20)	4.16(71)	2.07(74)
$Re(\beta_0); L_s \rightarrow \infty$	5.1893(3)	5.1866(3)	5.1822(3)	5.1769(5)	5.1745(6)
$10^3 Im(\beta_0)$	2.12(14)	2.12(16)	2.14(23)	1.77(65)	-0.39(77)

4.4. táblázat. A Lee-Yang zérusok helye öt $a\mu$ értéknél $N_s = 6, 8, 10$ és 12 rácson, valamint a termodinamikai limeszben fizikai pionttömegnél.

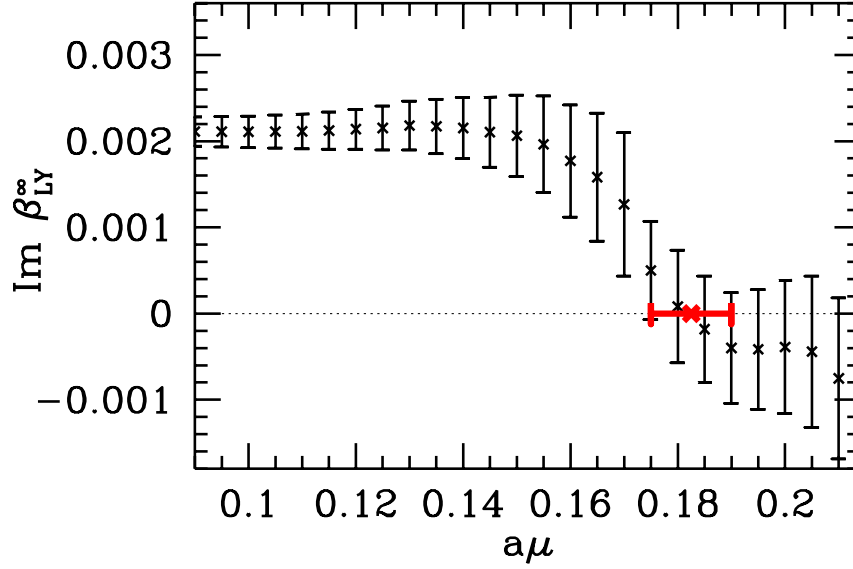
kerül a $\mu = 0$ tengelyhez.

4.5. A $\mu > 0$ állapotegyenlet

A fázisgörbe és a kritikus pont meghatározása után rátérünk az állapotegyenlet vizsgálatára [81, 82]. Korábban nem volt olyan módszer, mely képes lett volna megadni az állapotegyenletet $\mu > 0$ esetén. A többparaméteres átsúlyozás módszere ezt lehetővé teszi. Ahogy a korábbiakban, ezúttal is Wilson mértékhatást és javítatlan staggered hatást használunk $N_t = 4$ rácson. A könnyű kvarktömegeket a fizikainál nagyobbra választottuk; ezek körülbelül 400 MeV-es pionttömegnek felelnek meg. Ezáltal a renormáláshoz szükséges $T = 0$ szimulációk közvetlenül, a választott tömegnél elvégezhetők. A fizikai tömegek elérése és finomabb rácok használata a további kutatások fontos feladata lesz.

4.5.1. Az LCP meghatározása

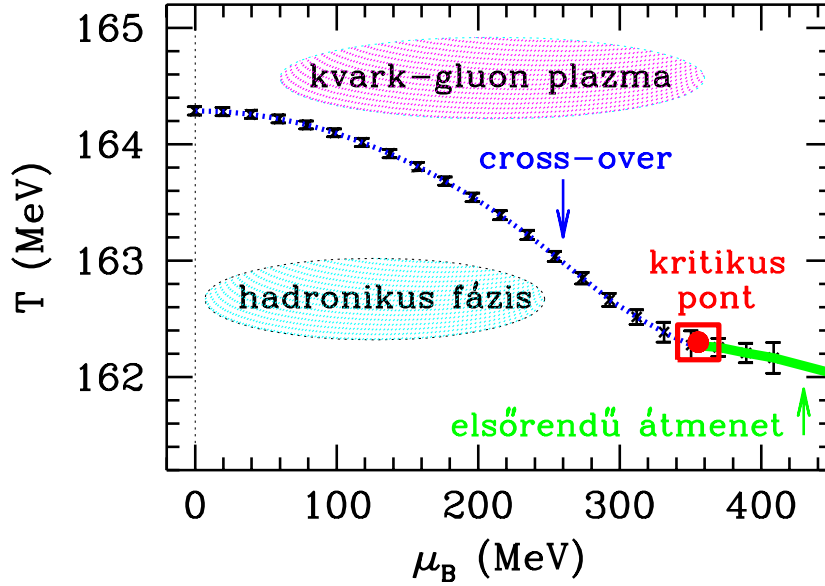
Az állapotegyenlet meghatározásakor, ahogy korábban is, a β csatolással változtatjuk a hőmérsékletet. Mivel a hőmérséklet, és így a rácállandó is nagy tartományban változik, fontos, hogy eközben az LCP mentén haladjunk. Ezúttal a korábbiaktól eltérő módszert használunk az LCP megadására. A definícióhoz szükséges három mennyiség a T_c átmeneti hőmérséklet, valamint az m_{ud} és m_s csupasz kvarktömegek. Az állapotegyenlet megadásakor látni fogjuk ennek a választásnak azt az előnyét, hogy egyes deriváltak egyszerűbbé válnak. Az LCP mentén tehát az m_{ud}/T_c és az m_s/m_{ud} mennyiségeket konstanson tartjuk. A



4.8. ábra. A Lee-Yang zérusok képzetes részének termodinamikai limesze $a\mu$ függvényében a fizikai piontömegnél.

β	$am_{u,d}$	am_{π}	am_K	am_{ρ}	r_0/a
5.09	0.02	0.3555(1)	0.8948(2)	1.361(9)	1.58(2)
5.09	0.04	0.4978(1)	0.9235(1)	1.391(4)	1.58(1)
5.09	0.06	0.6044(1)	0.9511(1)	1.423(4)	1.57(10)
5.16	0.02	0.3630(2)	0.9061(3)	1.306(10)	1.73(3)
5.16	0.04	0.5063(2)	0.9335(2)	1.344(8)	1.67(1)
5.16	0.06	0.6129(1)	0.9603(1)	1.389(4)	1.64(1)
5.19	0.02	0.3674(1)	0.9122(3)	1.287(8)	1.77(2)
5.19	0.04	0.5063(1)	0.9337(2)	1.325(6)	1.72(1)
5.19	0.06	0.6130(1)	0.9604(1)	1.366(2)	1.70(1)

4.5. táblázat. A $T = 0$ szimulációk eredménye három β értéknél, valamint három könnyű kvarktömegnél. A táblázatban szereplő mennyiségek fizikai kvarktömegnél felvett értékét királis extrapolációval határoztuk meg.



4.9. ábra. A fázisdiagram fizikai egységekben $N_f = 2 + 1$ kvark íz esetén a fizikai piontömegnél. A kék szaggatott vonal jelzi a crossover tartományt, míg a zöld folytonos vonal az elsőrendű fázisátmenetet. A kettőt elválasztó kritikus végpontot és annak bizonytalanságát a piros négyzet mutatja.

következő értékeket használtuk:

$$m_{ud}/T_c = 0.384 \qquad m_s/m_{ud} = 2.08 \qquad (4.28)$$

Ez $N_t = 4$ esetén az átmeneti pontban (ahol $N_t = 1/(aT_c)$) $am_s = 0.2$ és $am_{ud} = 0.096$ -nak felel meg.

Az LCP-t ezek után a következő módon határozzuk meg. $N_t = 4, 6, 8$ és 10 esetén meghatározzuk az átmeneti ponthoz tartozó β_c csatolást. A csupasz dimenziótlan kvarktömegek értékét pedig automatikusan tudjuk az $m_i/T_c = (am_i)N_t = \text{konstans}$ összefüggés alapján. Az átmeneti pontok meghatározásához a Poljakov hurok szuszceptibilitásának $(\langle |L|^2 \rangle - |\langle L \rangle|^2)$ maximumát kerestük meg. A szimulációkhoz $8^3 \cdot 4$, $12^3 \cdot 6$, $16^3 \cdot 8$ és $16^3 \cdot 10$ méretű rácokat használtunk. Az eredményt a 4.6 táblázat tartalmazza. Természetesen érdemes megvizsgálni, hogy az így kapott LCP mentén hogyan viselkednek a $T = 0$ -n meghatározható renormált mennyiségek. Ehhez az LCP négy (β, am_i) pontjában $14^3 \cdot 24$ méretű rácson meghatároztuk a pion és a ρ mezon tömegét, valamint r_0 és σ értékét. Ezeket szintén a 4.6 táblázatban találhatjuk. Látható, hogy ezeknek a mennyiségeknek a dimenziótlan kombinációi nem állandóak. Ez nem meglepő, hiszen ennek a feltételnek csak a kontinuum limeszhez közel kell teljesülnie.

Az állapotegyenlet megadásához természetesen négynél több pontban kell szimulációt végeznünk. Ezért a táblázatban szereplő négy pont között interpoláció

N_t	β	am_{ud}	am_π	am_ρ	r_0/a	$a\sqrt{\sigma}$
4	5.271	0.096	0.78514(6)	1.421(1)	2.02(1)	0.5889(9)
6	5.4	0.064	0.6805(1)	1.048(1)	3.19(5)	0.3686(6)
8	5.5	0.048	0.5595(13)	0.778(4)	3.96(9)	0.2697(5)
10	5.58	0.0384	0.480(3)	0.637(4)	4.44(5)	0.2358(4)

4.6. táblázat. Az LCP meghatározás eredménye (első három oszlop) és néhány mennyiség értéke az LCP mentén (4-7. oszlopok). Az első oszlop csupán az LCP meghatározásához használt N_t -t jelenti, ennek nincs köze a későbbi $T > 0$ szimulációkhoz, melyek mind $N_t = 4$ -nél történtek.

segítségével közelítettük az LCP-t.

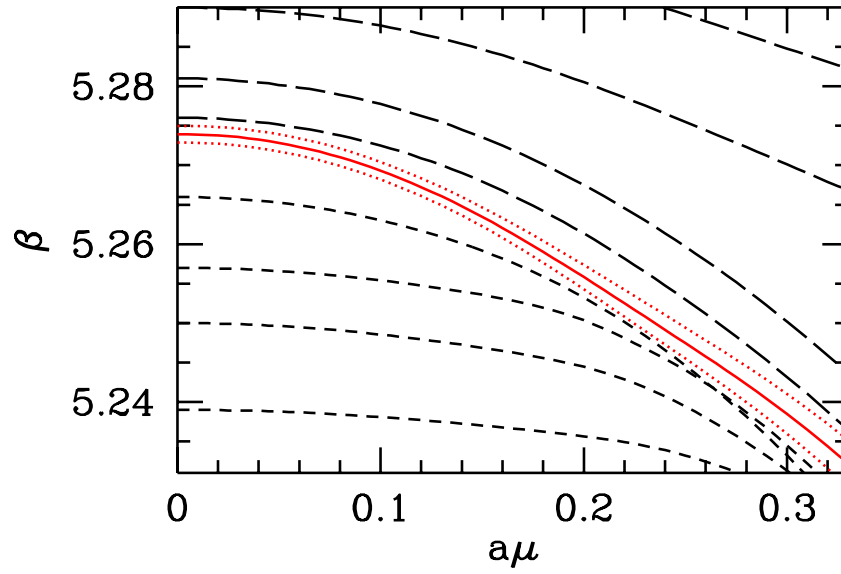
4.5.2. A legjobb átsúlyozás vonala

Az állapotegyenlet megadásához több mennyiség várható értékét is meg kell határoznunk $\mu > 0$ esetén. Ehhez a többparaméteres átsúlyozás (4.7) képletét használjuk. A fázisgörbe meghatározásakor a $\mu = 0$ átmeneti pontból indulva automatikusan optimális volt az átsúlyozás a fázisgörbe mentén. Jelen esetben azonban az átmenetnél kisebb, és annál lényegesen nagyobb hőmérsékletekre is szeretnénk eljutni. Itt már nem nagyon segít a fizikai intuíció, meg kell adnunk az átsúlyozáshoz optimális (β_0, μ_0) kezdőpontot (a tömegben ezúttal sem végzünk átsúlyozást), vagy adott kezdőpontra azokat a (β, μ) párokat, melyekbe optimálisan el tudunk jutni. Ezeket a görbéket hívjuk a legjobb átsúlyozás görbéjének. Mivel az átsúlyozás a $w(U)$ súlyokon alapul, és annál megbízhatóbb, minél kevésbé fluktuálnak ezek a súlyok, így a következő definíciót használjuk. Rögzítsük β_0 értékét és legyen $\mu_0 = 0$, valamint $m = m_0$. Adott μ esetén legyen $\beta(\mu)$ az a csatolás, melyre a

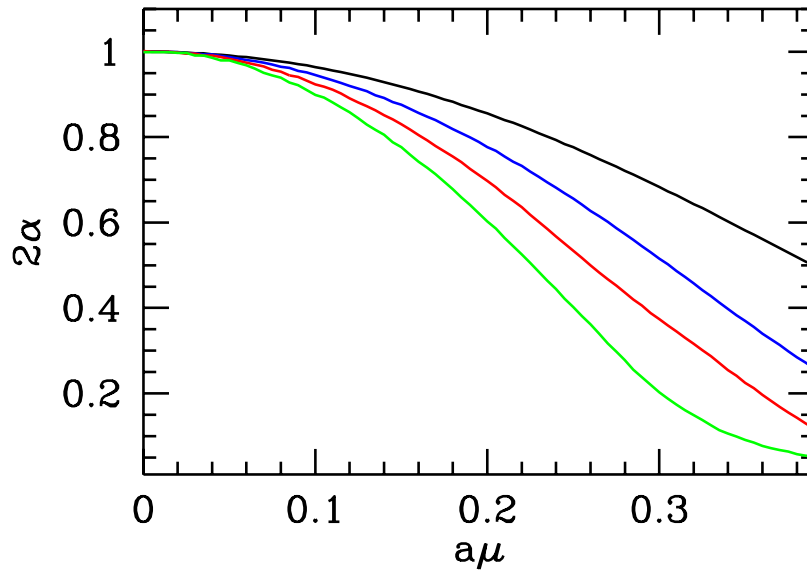
$$\sum_i (\operatorname{Re} \ln w(U_i; \beta, \mu))^2 - \left(\sum_i \operatorname{Re} \ln w(U_i; \beta, \mu) \right)^2 \quad (4.29)$$

kifejezés, vagyis $\operatorname{Re} \ln w(U_i)$ szórása minimális. A valós részre azért van szükség, mert a súlyok komplexek. Természetesen valós rész helyett abszolút értéket is használhatnánk, ez is hasonló vonalakat definiálna. A legjobb átsúlyozás vonalait a 4.10 ábrán láthatjuk.

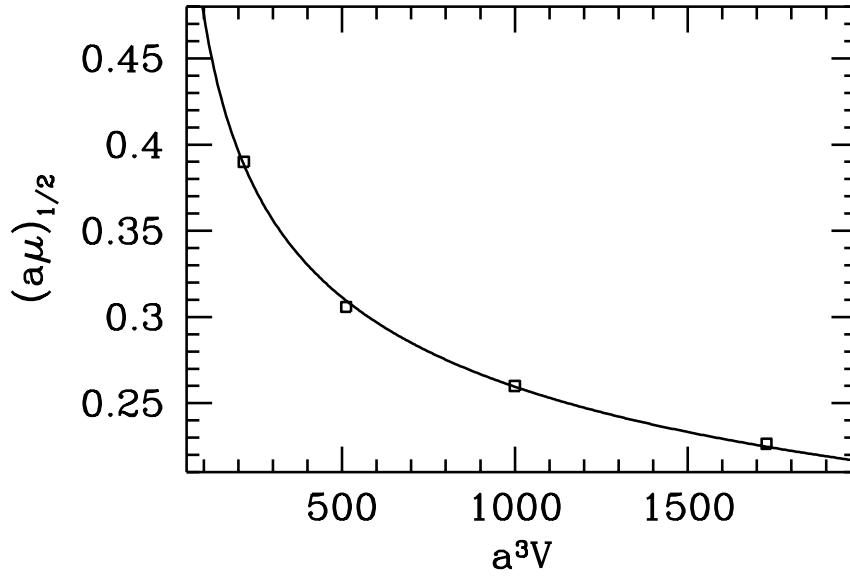
A fázisgörbe megkeresése során a Lee-Yang zérusok jelenléte $\mu > 0$ esetén jelezte, hogy még nem szembesültünk az átfedési problémával. Most ezt nehezebb észrevenni, ezért érdemes az átfedés mértékét definiálni. Ezt például a következő módon tehetjük meg. Egy adott $\{U_i\}$ konfiguráció halmazra és adott (β, μ)



4.10. ábra. A legjobb átsúlyozás vonalai a fázisgörbe alatt és felett. A piros vonal jelzi a fázisgörbét, a két pontozott vonal pedig annak bizonytalanságát.



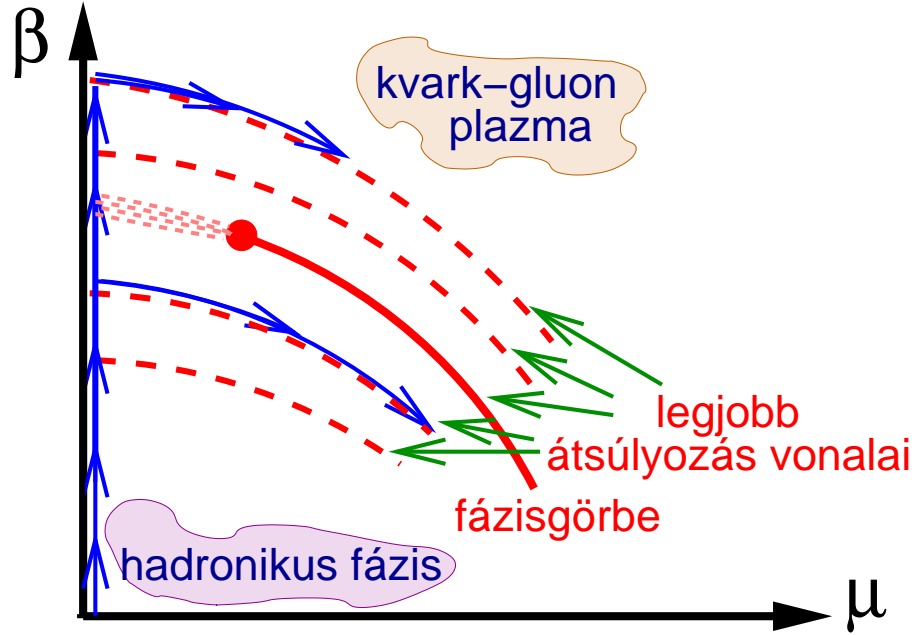
4.11. ábra. Az átfedés mértéke (2α) a kémiai potenciál függvényében négy különböző térfogat esetén T_c hőmérsékleten. A négy görbéhez tartozó rácsok mérete (fentről lefelé): $6^3 \cdot 4$ (fekete), $8^3 \cdot 4$ (kék), $10^3 \cdot 4$ (piros) és $12^3 \cdot 4$ (zöld).



4.12. ábra. Az $(a\mu)_{1/2}$ értéke négy rácstérfogathoz, valamint az illesztett $(a\mu)_{1/2}(V) = cV^{-\gamma}$ függvény.

párra számoljuk ki a $w(U_i)$ súlyokat. Rendezzük ezek után a konfigurációkat a súlyok valós része szerint csökkenő sorrendbe. Az átfedés mértéke legyen 2α , ha a konfigurációk első α hányada adja az összes súly összegének $1 - \alpha$ hányadát. A definíció alapján látható, hogy minél kevésbé egyenletesen oszlanak meg a súlyok, annál kisebb α értéke. Ha nem végzünk átsúlyozást és minden súly értéke azonos, akkor $2\alpha = 1$. A 4.11 ábrán láthatjuk 2α értékét a fázisgörbe mentén négy különböző térfogatra. Látható, hogy növekvő μ -re 2α értéke csökken, mégpedig annál gyorsabban, minél nagyobb a térfogat. Mivel a w súlyok exponensben tartalmazzák a térfogatot, azt várjuk, hogy konstans μ esetén 2α értéke exponenciálisan csökken. Érdekesebb a helyzet, ha azt vizsgáljuk, hogy adott térfogaton mekkora μ értékig működik az átsúlyozás. Ehhez érdemes definiálni az $(a\mu)_{1/2}$ mennyiséget, úgy, hogy adott V térfogathoz $2\alpha((a\mu)_{1/2}) = 1/2$. A 4.12 ábrán láthatjuk $(a\mu)_{1/2}$ értékét a négy különböző térfogat esetén. A pontosra $(a\mu)_{1/2}(V) = cV^{-\gamma}$ alakú függvényt illesztettünk, ahol $\gamma \approx 0.26$ adódott.

A kontinuum limesz szempontjából nagyon fontos γ értéke. Amennyiben $\gamma \leq 0.25$ teljesül, a kontinuum limesz során nem nő exponenciálisan a szükséges konfigurációk száma. Ugyanis, ha adott fizikai μ értékig akarunk átsúlyozással eljutni, akkor $a\mu$ értéke a rácstérfogathoz arányosan csökken. A rácstérfogathoz (ezúttal az euklideszi idő irányát is beleértve) a^4 -nel arányos. Tehát $\gamma \leq 0.25$ esetén el tudjuk érni ugyanazt a fizikai μ értéket tetszőleges rácstérfogathoz úgy, hogy közben az átfedés mértéke ne romoljon.



4.13. ábra. A nyomás kiszámításához használt integrálási görbék a β - μ síkon (kék vonalak). Első lépésben $\mu = 0$ -nál az LCP mentén integrálunk valamely β értékig, majd a legjobb átsúlyozás vonala mentén (piros szaggatott görbék) haladunk tovább.

4.5.3. A nyomás és az energiasűrűség meghatározása

Az állapotegyenlet meghatározása a $\mu = 0$ esethez hasonlóan történik. Tekintsük röviden át, hogyan módosulnak a képletek a kémiai potenciál bevezetése miatt. A nyomást ezúttal is az integrál módszer segítségével számíthatjuk ki, most azonban eggyel több dimenziós a paraméter tér: a $(\beta, am_q, a\mu)$ térben kell integrálnunk:

$$\frac{p}{T^4} = N_t^4 \int_{(\beta_0, am_{q0}, a\mu_0)}^{(\beta, am_q, a\mu)} d(\beta, am_q, a\mu) \left[\frac{1}{N_t N_s^3} \left(\frac{\partial \ln Z / \partial \beta}{\partial \ln Z / \partial (a\mu)} \right) - \frac{1}{N_{t0} N_{s0}^3} \left(\frac{\partial \ln Z_0 / \partial \beta}{\partial \ln Z_0 / \partial (a\mu)} \right) \right]. \quad (4.30)$$

A parciális deriváltakban ezúttal is felismerhetünk megfigyelhető mennyiségeket. Mivel most Wilson mértékhatást használunk, így a β szerinti derivált a plakett átlaggal arányos: $\partial \ln Z / \partial \beta = -\langle P \rangle$. A kvarktömegek most is a királis kondenzátumokat adják. Az $a\mu$ szerinti derivált az n_q kvarkszám sűrűséggel arányos: $\partial \ln Z / \partial (a\mu) = N_t N_s^3 \langle n_q \rangle$.

A renormálás a divergenciák eltüntetésére szolgál. Mivel a divergenciák μ -tól nem függnének, így a legegyszerűbb a levonást a $\mu = 0$ -n számolt Z_0 segítségével megtenni, vagyis $\mu_0 = 0$ választással élni. Ekkor a $\partial \ln Z_0 / \partial(a\mu)$ derivált azonosan nulla, mivel Z_0 páros függvénye $a\mu$ -nek. Tehát a nyomás az alábbi alakba írható:

$$\frac{p}{T^4} = N_t^4 \int_{(\beta_0, am_{ud0}, am_{s0}, 0)}^{(\beta, am_{ud}, am_s, a\mu)} d(\beta, am_{ud}, am_s, a\mu) \times \left[\frac{1}{N_t N_s^3} \begin{pmatrix} \langle -S_g / \beta \rangle \\ \langle \bar{\psi} \psi_{ud} \rangle \\ \langle \bar{\psi} \psi_s \rangle \\ N_t N_s^3 \langle n_q \rangle \end{pmatrix} - \frac{1}{N_{t0} N_{s0}^3} \begin{pmatrix} \langle -S_g / \beta \rangle_0 \\ \langle \bar{\psi} \psi_{ud} \rangle_0 \\ \langle \bar{\psi} \psi_s \rangle_0 \\ 0 \end{pmatrix} \right]. \quad (4.31)$$

Az integrál kiszámításához tehát a plakett, a királis kondenzátumok és a kvark-szám sűrűség várható értékére van szükségünk. Ezeket $\mu > 0$ esetben a több-paraméteres átsúlyozás módszerével számítjuk ki. Az integrálást a 4.13 ábrán látható görbék mentén végeztük. Először nulla kémiai potenciálnál integrálunk az LCP mentén valamely β értékig, majd a legjobb átsúlyozás vonalát követjük. A renormáláshoz szükséges nulla hőmérsékletű járuléknál végig a $\mu = 0$ tengelyen maradunk.

Az energiasűrűség definíciója nemnulla kémiai potenciál esetén:

$$\epsilon = \frac{T^2}{V} \frac{\partial \ln Z}{\partial T} - \frac{\mu T}{V} \frac{\partial \ln Z}{\partial \mu}. \quad (4.32)$$

Az első tag érvényes nulla kémiai potenciál esetén. Így az $\epsilon - 3p$ kombináció ezúttal is tartalmaz egy rácsállandó szerinti deriváltat, azonban a második tag miatt lesz egy μ deriváltas tag is:

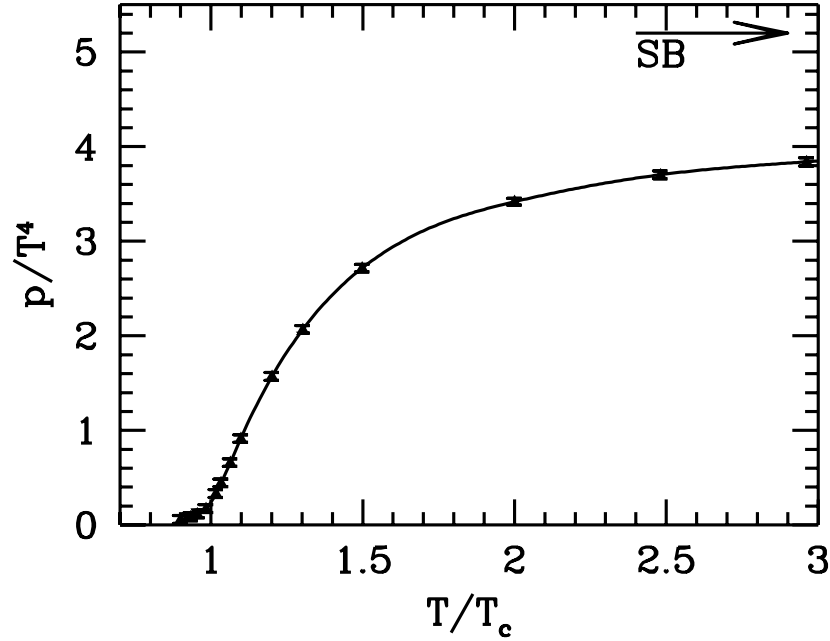
$$\frac{\epsilon - 3p}{T^4} = - \frac{N_t^3}{N_s^3} a \frac{\partial(\log Z)}{\partial a} \Big|_{\mu} + \frac{N_t^3}{N_s^3} a \mu \frac{\partial(\log Z)}{\partial(a\mu)} \Big|_a. \quad (4.33)$$

Amennyiben konstans $a\mu$ mellett deriválunk, ez a kifejezés így egyszerűsödik:

$$\frac{\epsilon - 3p}{T^4} = - \frac{N_t^3}{N_s^3} a \frac{\partial(\log Z)}{\partial a} \Big|_{a\mu}. \quad (4.34)$$

Az energiasűrűséget ezúttal is származtathatjuk a nyomásból, ám mivel most közvetlenül tudunk $T = 0$ szimulációkat végezni, a (4.34) képletet használjuk $\epsilon - 3p$ kiszámítására. A rácsállandó szerinti deriváltat átírhatjuk a paraméterek szerinti deriváltakra:

$$\frac{\partial}{\partial a} \Big|_{\mu} = \left[\frac{\partial \beta}{\partial a} \frac{\partial}{\partial \beta} + \sum_i \frac{\partial(am_i)}{\partial a} \frac{\partial}{\partial(am_i)} \right]_{a\mu=\text{konstans}}, \quad (4.35)$$



4.14. ábra. A nyomás $\mu = 0$ esetén. A Stefan-Boltzmann limeszt a nyíl jelzi.

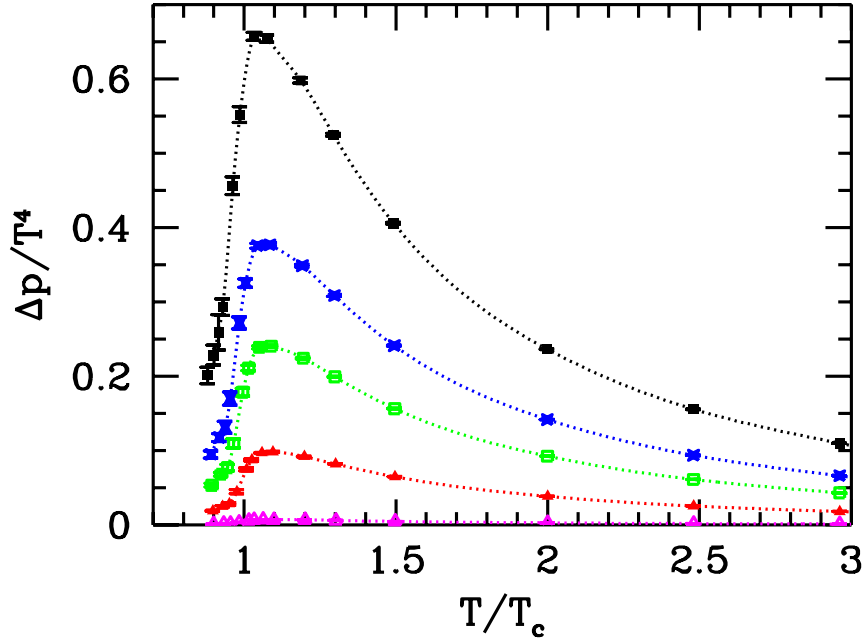
ahol az összegzés a könnyű és ritka kvarkokra értendő. A $\partial\beta/\partial a$ deriváltat természetesen az LCP mentén kell vennünk, hiszen a rácsállandó változtatása során az LCP-t követjük. Ugyanez igaz a $\partial(am_i)/\partial a$ deriváltakra is. Ezúttal az LCP-t úgy definiáltuk, hogy a csupasz kvarktömegek konstansok, ezért $\partial(am_i)/\partial a = m_i$ és $\partial\beta/\partial a = m_i \cdot \partial\beta/\partial(am_i)$. Visszahelyettesítve és beírva a deriváltak helyére a megfigyelhető mennyiségeket:

$$\frac{\epsilon - 3p}{T^4} = -\frac{N_t^3}{N_s^3} \left(-\langle P \rangle a \frac{\partial\beta}{\partial a} \Big|_{\text{LCP}} + \langle \bar{\psi}\psi_{ud} \rangle am_{ud} + \langle \bar{\psi}\psi_s \rangle am_s \right). \quad (4.36)$$

Az állapotegyenlet meghatározásához az LCP mentén összesen 14 β értéknél pontonként átlagosan 1200 konfigurációt generáltunk. A nyomás értékét ezúttal is megszoroztuk a Stefan-Boltzmann értékek arányával, c_{kont}/c_{N_t} -vel. A kémiai potenciáltól való függés hangsúlyozása érdekében bevezetjük a $\Delta p(T, \mu) = p(T, \mu) - p(T, \mu = 0)$ nyomáskülönbséget. Ezt is normáljuk a

$$c_\mu = \frac{\Delta p(T \rightarrow \infty, \mu)_{\text{kontinuum}}}{\Delta p(T \rightarrow \infty, \mu)_{N_t=4}} \quad (4.37)$$

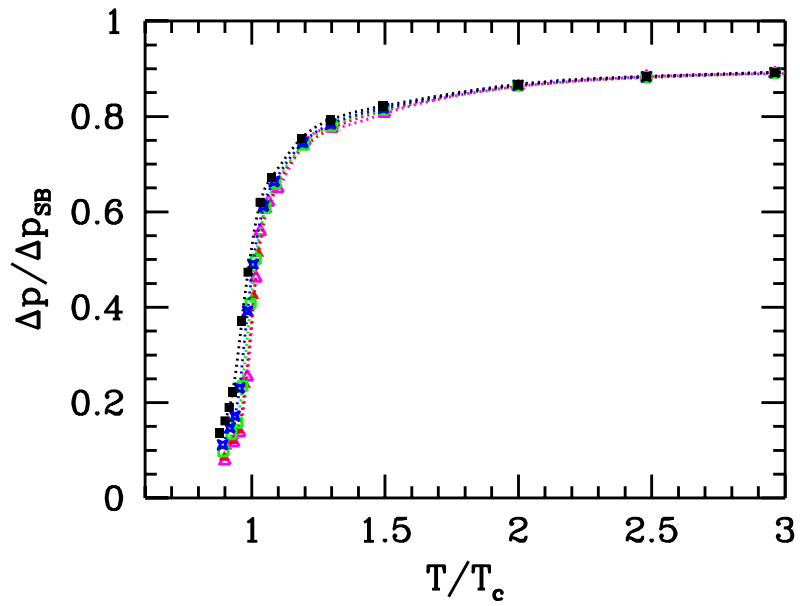
hányadossal. Ennek értéke kiszámítható: $c_\mu = 0.446$. A $\mu = 0$ nyomás a 4.14 ábrán látható. Ennek segítségével tudjuk meghatározni a nyomás abszolút értékét $\mu > 0$ esetén. A 4.15 ábra mutatja Δp értékét a hőmérséklet függvényében öt különböző barionikus kémiai potenciál esetén: a négy görbe $\mu_B = 100, 210, 330,$



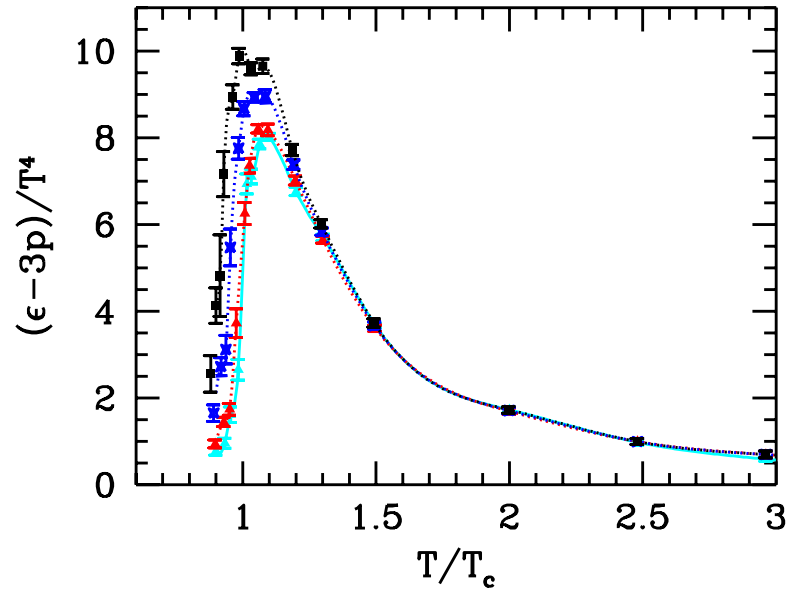
4.15. ábra. A Δp nyomáskülönbség öt különböző barionikus kémiai potenciál esetén. A görbék (lentől felfelé) rendre $\mu_B = 100, 210, 330, 410$ és 530 MeV-nek felelnek meg.

410 és 530 MeV-nek felel meg. Érdekes Δp értékét elosztani $\Delta p_{SB} = \Delta p(T \rightarrow \infty, \mu) = N_f \mu^2 T^2 / 2$ -vel. A 4.16 ábra mutatja az így kapott görbéket. Látható, hogy ezek a görbék szinte teljesen függetlenek μ -tól. Tehát, ha ezt az egy görbét és a $\mu = 0$ nyomást (4.14 ábra) megadjuk, akkor ezekből $p(T, \mu)$ egy tág paraméter tartományban ($T = 0.8 \dots 3T_c; \mu_B = 0 \dots 530$ MeV) jó közelítéssel meghatározható.

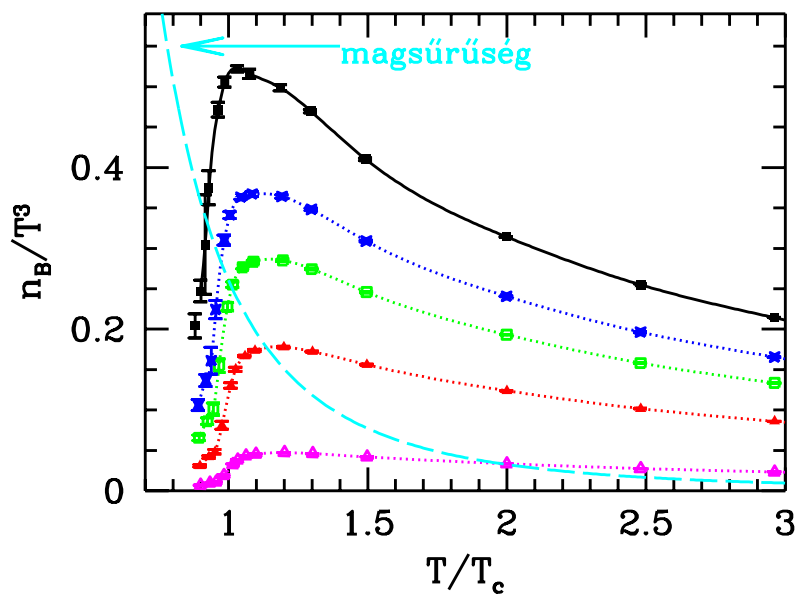
Az $\epsilon - 3p$ kölcsönhatási mérték látható a 4.17 ábrán négy kémiai potenciál érték esetén. Mivel a kémiai potenciál bevezetésének célja nemnulla barionsűrűség elérése, mindenképpen érdemes a barionsűrűséget ($n_B = n_q/3$) is megvizsgálni. A 4.18 ábrán láthatjuk a sűrűséget a hőmérséklet függvényében. Összehasonlításként berajzoltuk a magsűrűségnek megfelelő vonalat. Látható, hogy a magsűrűség többszörösét el tudjuk érni.



4.16. ábra. A Δp nyomáskülönbség a Δp_{SB} Stefan-Boltzmann limesszel normálva öt különböző barionikus kémiai potenciál esetén. A görbék $\mu_B = 100$ (lila), 210 (piros), 330 (zöld), 410 (kék) és 530 MeV-nek (fekete) felelnek meg. Láthatjuk, hogy alig van μ függés, az öt görbe egybeesik.



4.17. ábra. Az $\epsilon - 3p$ kölcsönhatási mérték öt különböző barionikus kémiai potenciál esetén. A görbék (lentől felfelé) $\mu_B = 0, 210, 410$ és 530 MeV-nek felelnek meg.



4.18. ábra. Az n_B barionsűrűség öt különböző barionikus kémiai potenciál esetén. A görbék (lentől felfelé) $\mu_B = 100, 210, 330, 410$ és 530 MeV-nek felelnek meg. Összehasonlításként megadtuk a magsűrűségnek megfelelő görbét is.

5. fejezet

Összefoglalás, kitekintés

A QCD fázisdiagramjának pontos ismerete fontos szerepet játszik a korai világegyetem megértésében és a nehézion ütközések leírásában. Az értekezésben ismertetett eredmények jelentősen hozzájárulnak a fázisdiagram feltérképezéséhez. Az eredmények összefoglalásán túl megkíséreljük megbecsülni, hogy mely területeken várhatóak jelentős új eredmények a közeljövőben.

Egy rácstérelméleti eredmény akkor tekinthető teljesnek, ha az a fizikailag helyes paraméter értékek használatával (QCD esetén fizikai kvarktömegek használatával) született és a kontinuum extrapolációt elvégezték.

Meghatároztuk a QCD átmenet rendjét fizikai kvarktömegek használatával a kontinuum limeszben. A renormált királis szuszceptibilitás csúcsának véges méret függését vizsgáltuk. Az analízis azt mutatta, hogy a szuszceptibilitás lényegében független a térfogattól, a $V \rightarrow \infty$ limeszben nem divergál. Ebből arra következtethetünk, hogy a QCD-ben nincs fázisátmenet, csupán analitikus crossover. Az analízishez Symanzik javított mérték- és stout javított staggered fermion hatást használtunk négy különböző rácsfelbontás mellett. Az eredmény teljesnek tekinthető. Végleges eredményről akkor beszélhetünk, ha legalább egy független analízis, lehetőleg más fermion regularizációval megerősíti ezt. Eddig ilyen munka nem született.

Mivel az átmenet crossover, hőmérséklete függ a pontos definícióhoz használt mennyiségtől. Három különböző mennyiség segítségével definiálva, mindhárom esetben meghatároztuk T_c értékét. Az első mennyiség a renormált királis szuszceptibilitás, $\chi_{\bar{\psi}\psi}$. A $\chi_{\bar{\psi}\psi}(T)$ függvény maximum helye volt az első definíciónk. A második mennyiség a ritka kvarkszám szuszceptibilitás (χ_s). Ez esetben a $\chi_s(T)$ függvény inflexiós pontja adja T_c -t. A harmadik mennyiség a kvark bezárással kapcsolatos Poljakov hurok (L). Ebben az esetben is az inflexiós pont definiálja az átmeneti hőmérsékletet.

A meghatározott T_c -ket mindhárom esetben négy rácsfelbontás segítségével

extrapoláltuk a kontinuumba. Az eredmények:

$$\begin{aligned} T_c(\chi_{\bar{\psi}\psi}) &= 151(3)(3) \text{ MeV} \\ T_c(\chi_s) &= 175(2)(4) \text{ MeV} \\ T_c(L) &= 176(3)(4) \text{ MeV} \end{aligned}$$

Mindhárom esetben az első hiba a $T > 0$, míg a második a $T = 0$ analízisből származik. Látható, hogy a különböző definíciók lényegesen különböző értékeket adnak. Az analízishez ezúttal is Symanzik javított mérték- és stout javított staggered fermion hatást használtuk. Ez az eredmény is teljesnek tekinthető, de –az átmenet rendjéhez hasonlóan– itt is szükség van egy független analízisre. A legfrissebb független munkában mindössze két rácsfelbontást használtak, mely inkonzisztens kontinuum limeszhez vezetett [59].

Kiterjesztve az analízist alacsonyabb és magasabb hőmérsékletekre, meghatároztuk az állapotegyenletet két rácsfelbontás mellett. Az integrál módszer segítségével megadtuk a nyomást a hőmérséklet függvényében a $0.8T_c \dots 3T_c$ tartományban. Az integrálást természetesen az állandó fizika vonala mentén végeztük. Az energiasűrűséget, az entrópiasűrűséget és a hangsebességet a nyomásból származtattuk. A két rácsfelbontás még nem alkalmas megbízható kontinuum extrapoláció elvégzésére, legalább egy harmadikra szükség van. Ez a közeljövőben várható, az eredmény lehetőségét ad majd e kérdésnek a lezárására is.

Nemnulla kémiai potenciál esetén az előjel probléma nagymértékben megnehezíti a vizsgálatokat. Kidolgoztuk a többparaméteres átsúlyozás módszerét, mellyel először nyílt mód arra, hogy nemnulla kémiai potenciált rács QCD segítségével tanulmányozhassunk. A módszer segítségével a $\mu = 0$ átmeneti pontban generált konfigurációk használatával is lehetőség nyílik a fázisgörbe meghatározására. Megkerestük a Lee-Yang zérusokat több különböző kémiai potenciálra. Ez definiálta a fázisgörbét. Fizikai egységekre korábbi $T = 0$ eredmények felhasználásával tértünk át.

Az analízist négy kvark íz és egy rácsfelbontás mellett végeztük, Wilson mértékhatás és javítatlan staggered hatás használatával. Ez volt az első eredmény a $\mu > 0$ fázisdiagramra, melyet azóta több független analízis is megerősített [83–85]. Mivel a valóságban nem négy azonos tömegű kvark van, ennek az analízisnek a fő jelentősége a módszer tesztelése. Itt nyilván nem várható kontinuum extrapoláció.

A többparaméteres átsúlyozás módszerét általánosítottuk négynél kevesebb kvark íz esetére. Ez lehetővé tette a fizikailag érdekes 2+1 eset tanulmányozását. A nehézség abból adódott, hogy staggered fermionok esetén egy komplex szám tört hatványát kell venni négynél kevesebb íz esetén, ez pedig nem egyértelmű. A μ -ben való folytonosság kiszabásával egyértelművé tettük ezt a választást.

A 2+1 ízű QCD fázisdiagramját először a fizikainál valamivel nagyobb tömegű kvarkok esetén vizsgáltuk. A pionok tömege körülbelül 230 MeV volt. Meghatároztuk a fázisgörbét fizikai egységekben. A rácsállandó beállításához nulla hőmérsékletű szimulációkat is végeztünk.

A Lee-Yang zérusok képzetes részének térfogatfüggését vizsgálva meghatároztuk, hogy a fázisgörbe egyes pontjaiban mi az átmenet rendje. Azt tapasztaltuk, hogy egy kritikus μ_E érték alatt az átmenet crossover, fölötte elsőrendű. A kettőt elválasztó kritikus végpont a $\mu_E = 725 \pm 35$ MeV barionikus kémiai potenciálnál és $T_E = 160 \pm 3.5$ MeV hőmérsékletnél van. A véges térfogat analízishez három térfogatot használtunk.

Ezután megismételtük az analízist a fizikai kvarktömegekkel, négy térfogatot használva (melyek közül kettő is nagyobb volt, mint amelyeket korábban használtunk). A fenomenologikus várakozásoknak megfelelően a kvarktömeg csökkenése miatt a kritikus pont eltolódott kisebb μ értékek felé: az új értékek $\mu_E = 360 \pm 40$ MeV és $T_E = 162 \pm 2$ MeV.

Az irodalomban ezen az eredményen kívül csak alsó korlátot találunk a kritikus pontra [86]. A közeljövőben várható, hogy a fázisdiagramot kis μ értékekre sikerül finomabb rácsokon is meghatározni. Néhány éven belül meghatározható a fázisgörbe görbülete $\mu = 0$ -nál a kontinuum limeszben. A kritikus pont meghatározása során már az előjel probléma is gondot okozhat finomabb rácsokon. Ezért ebben a kérdésben lényegesen nehezebb becslést adni. Néhány éven belül nem valószínű teljes, kontinuum extrapolált eredmény születése.

A T - μ síkon a fázisgörbe alatti és feletti területen meghatároztuk az állapotegyenletet. Ehhez az integrál módszert általánosítottuk. Definiáltuk a legjobb átsúlyozás vonalát, és e mentén hajtottuk végre a többparaméteres átsúlyozást. Megadtuk a nyomást, az energiasűrűséget és a barionsűrűséget a hőmérséklet és a kémiai potenciál függvényében.

Az analízishez a fizikainál valamivel nagyobb, körülbelül 230 MeV-es pionnak megfelelő kvarktömegeket használtunk. Ez az irodalomban az első olyan munka mely meghatározta a $\mu > 0$ állapotegyenletet. Később más, független munkák is megerősítették az eredményeket [87,88]. A fizikai kvarktömeg elérése ma már nem jelent problémát. A kontinuum extrapoláció azonban, hasonlóan a fázisgörbéhez, csak a $\mu = 0$ tengely közvetlen közelében valószínűsíthető a közeljövőben.

Irodalomjegyzék

- [1] J. Kuti, J. Polonyi, and K. Szlachanyi, *Monte carlo study of $SU(2)$ gauge theory at finite temperature*, Phys. Lett. **B98** (1981) 199.
- [2] L. D. McLerran and B. Svetitsky, *A monte carlo study of $SU(2)$ yang-mills theory at finite temperature*, Phys. Lett. **B98** (1981) 195.
- [3] T. Celik, J. Engels, and H. Satz, *The order of the deconfinement transition in $SU(3)$ yang- mills theory*, Phys. Lett. **B125** (1983) 411.
- [4] J. B. Kogut *et al.*, *Deconfinement and chiral symmetry restoration at finite temperatures in $SU(2)$ and $SU(3)$ gauge theories*, Phys. Rev. Lett. **50** (1983) 393.
- [5] S. A. Gottlieb *et al.*, *The deconfining phase transition and the continuum limit of lattice quantum chromodynamics*, Phys. Rev. Lett. **55** (1985) 1958.
- [6] F. R. Brown, N. H. Christ, Y. F. Deng, M. S. Gao, and T. J. Woch, *Nature of the deconfining phase transition in $SU(3)$ lattice gauge theory*, Phys. Rev. Lett. **61** (1988) 2058.
- [7] M. Fukugita, M. Okawa, and A. Ukawa, *Order of the deconfining phase transition in $SU(3)$ lattice gauge theory*, Phys. Rev. Lett. **63** (1989) 1768.
- [8] R. D. Pisarski and F. Wilczek, *Remarks on the chiral phase transition in chromodynamics*, Phys. Rev. **D29** (1984) 338–341.
- [9] S. P. Klevansky, *The nambu-jona-lasinio model of quantum chromodynamics*, Rev. Mod. Phys. **64** (1992) 649–708.
- [10] I. Montvay and G. Munster, *Quantum fields on a lattice*, . Cambridge, UK: Univ. Pr. (1994) 491 p. (Cambridge monographs on mathematical physics).
- [11] H. B. Nielsen and M. Ninomiya, *Absence of neutrinos on a lattice. 1. proof by homotopy theory*, Nucl. Phys. **B185** (1981) 20.

- [12] H. B. Nielsen and M. Ninomiya, *Absence of neutrinos on a lattice. 2. intuitive topological proof*, Nucl. Phys. **B193** (1981) 173.
- [13] H. Neuberger, *Exactly massless quarks on the lattice*, Phys. Lett. **B417** (1998) 141–144, [[hep-lat/9707022](#)].
- [14] M. Luscher, *Exact chiral symmetry on the lattice and the Ginsparg-Wilson relation*, Phys. Lett. **B428** (1998) 342–345, [[hep-lat/9802011](#)].
- [15] Z. Fodor, S. D. Katz, and K. K. Szabo, *Dynamical overlap fermions, results with hybrid monte-carlo algorithm*, JHEP **08** (2004) 003, [[hep-lat/0311010](#)].
- [16] N. Cundy *et al.*, *Numerical methods for the QCD overlap operator. iii: Nested iterations*, Comput. Phys. Commun. **165** (2005) 221–242, [[hep-lat/0405003](#)].
- [17] T. A. DeGrand and S. Schaefer, *Physics issues in simulations with dynamical overlap fermions*, Phys. Rev. **D71** (2005) 034507, [[hep-lat/0412005](#)].
- [18] G. I. Egri, Z. Fodor, S. D. Katz, and K. K. Szabo, *Topology with dynamical overlap fermions*, JHEP **01** (2006) 049, [[hep-lat/0510117](#)].
- [19] C. B. Lang, P. Majumdar, and W. Ortner, *QCD with two dynamical flavors of chirally improved quarks*, Phys. Rev. **D73** (2006) 034507, [[hep-lat/0512014](#)].
- [20] **JLQCD** Collaboration, H. Fukaya *et al.*, *Lattice gauge action suppressing near-zero modes of $h(w)$* , Phys. Rev. **D74** (2006) 094505, [[hep-lat/0607020](#)].
- [21] C. Bernard, M. Golterman, and Y. Shamir, *Observations on staggered fermions at non-zero lattice spacing*, Phys. Rev. **D73** (2006) 114511, [[hep-lat/0604017](#)].
- [22] P. Hasenfratz and F. Niedermayer, *Perfect lattice action for asymptotically free theories*, Nucl. Phys. **B414** (1994) 785–814, [[hep-lat/9308004](#)].
- [23] T. A. DeGrand, A. Hasenfratz, P. Hasenfratz, and F. Niedermayer, *The classically perfect fixed point action for $SU(3)$ gauge theory*, Nucl. Phys. **B454** (1995) 587–614, [[hep-lat/9506030](#)].

- [24] J. Polonyi and H. W. Wyld, *Microcanonical simulation of fermionic systems*, Phys. Rev. Lett. **51** (1983) 2257.
- [25] R. T. Scalettar, D. J. Scalapino, and R. L. Sugar, *New algorithm for the numerical simulation of fermions*, Phys. Rev. **B34** (1986) 7911–7917.
- [26] S. Duane, A. D. Kennedy, B. J. Pendleton, and D. Roweth, *Hybrid monte carlo*, Phys. Lett. **B195** (1987) 216–222.
- [27] S. A. Gottlieb, W. Liu, D. Toussaint, R. L. Renken, and R. L. Sugar, *Hybrid molecular dynamics algorithms for the numerical simulation of quantum chromodynamics*, Phys. Rev. **D35** (1987) 2531–2542.
- [28] M. A. Clark and A. D. Kennedy, *Accelerating staggered fermion dynamics with the rational hybrid monte carlo (rhmc) algorithm*, Phys. Rev. **D75** (2007) 011502, [hep-lat/0610047].
- [29] C. Morningstar and M. J. Peardon, *Analytic smearing of $SU(3)$ link variables in lattice QCD*, Phys. Rev. **D69** (2004) 054501, [hep-lat/0311018].
- [30] T. Blum, L. Karkkainen, D. Toussaint, and S. A. Gottlieb, *The beta function and equation of state for QCD with two flavors of quarks*, Phys. Rev. **D51** (1995) 5153–5164, [hep-lat/9410014].
- [31] **MILC** Collaboration, C. W. Bernard *et al.*, *The equation of state for two flavor QCD at $n(t) = 6$* , Phys. Rev. **D55** (1997) 6861–6869, [hep-lat/9612025].
- [32] C. Bernard *et al.*, *The equation of state for QCD with 2+1 flavors of quarks*, PoS **LAT2005** (2006) 156, [hep-lat/0509053].
- [33] F. Karsch, E. Laermann, and A. Peikert, *The pressure in 2, 2+1 and 3 flavour QCD*, Phys. Lett. **B478** (2000) 447–455, [hep-lat/0002003].
- [34] F. Karsch, E. Laermann, and A. Peikert, *Quark mass and flavor dependence of the QCD phase transition*, Nucl. Phys. **B605** (2001) 579–599, [hep-lat/0012023].
- [35] Y. Aoki, Z. Fodor, S. D. Katz, and K. K. Szabo, *The equation of state in lattice QCD: With physical quark masses towards the continuum limit*, JHEP **01** (2006) 089, [hep-lat/0510084].

- [36] Y. Aoki, Z. Fodor, S. D. Katz, and K. K. Szabo, *The QCD transition temperature: Results with physical masses in the continuum limit*, Phys. Lett. **B643** (2006) 46–54, [hep-lat/0609068].
- [37] R. Sommer, *A new way to set the energy scale in lattice gauge theories and its applications to the static force and alpha-s in SU(2) yang-mills theory*, Nucl. Phys. **B411** (1994) 839–854, [hep-lat/9310022].
- [38] C. Aubin *et al.*, *Light hadrons with improved staggered quarks: Approaching the continuum limit*, Phys. Rev. **D70** (2004) 094505, [hep-lat/0402030].
- [39] A. Gray *et al.*, *The upsilon spectrum and $m(b)$ from full lattice QCD*, Phys. Rev. **D72** (2005) 094507, [hep-lat/0507013].
- [40] J. Gasser and H. Leutwyler, *Chiral perturbation theory: Expansions in the mass of the strange quark*, Nucl. Phys. **B250** (1985) 465.
- [41] Y. Aoki, G. Endrodi, Z. Fodor, S. D. Katz, and K. K. Szabo, *The order of the quantum chromodynamics transition predicted by the standard model of particle physics*, Nature **443** (2006) 675–678, [hep-lat/0611014].
- [42] D. J. Schwarz, *The first second of the universe*, Annalen Phys. **12** (2003) 220–270, [astro-ph/0303574].
- [43] E. Witten, *Cosmic separation of phases*, Phys. Rev. **D30** (1984) 272–285.
- [44] J. H. Applegate and C. J. Hogan, *Relics of cosmic quark condensation*, Phys. Rev. **D31** (1985) 3037–3045.
- [45] M. A. Halasz, A. D. Jackson, R. E. Shrock, M. A. Stephanov, and J. J. M. Verbaarschot, *On the phase diagram of QCD*, Phys. Rev. **D58** (1998) 096007, [hep-ph/9804290].
- [46] J. Berges and K. Rajagopal, *Color superconductivity and chiral symmetry restoration at nonzero baryon density and temperature*, Nucl. Phys. **B538** (1999) 215–232, [hep-ph/9804233].
- [47] B.-J. Schaefer and J. Wambach, *The phase diagram of the quark meson model*, Nucl. Phys. **A757** (2005) 479–492, [nucl-th/0403039].
- [48] T. Herpay, A. Patkos, Z. Szepe, and P. Szepfalusy, *Mapping the boundary of the first order finite temperature restoration of chiral symmetry in the $(m(\pi) - m(k))$ -plane with a linear sigma model*, Phys. Rev. **D71** (2005) 125017, [hep-ph/0504167].

- [49] F. R. Brown *et al.*, *On the existence of a phase transition for QCD with three light quarks*, Phys. Rev. Lett. **65** (1990) 2491–2494.
- [50] **CP-PACS** Collaboration, A. Ali Khan *et al.*, *Phase structure and critical temperature of two flavor QCD with renormalization group improved gauge action and clover improved wilson quark action*, Phys. Rev. **D63** (2001) 034502, [hep-lat/0008011].
- [51] F. Karsch, E. Laermann, and C. Schmidt, *The chiral critical point in 3-flavor QCD*, Phys. Lett. **B520** (2001) 41–49, [hep-lat/0107020].
- [52] F. Karsch *et al.*, *Where is the chiral critical point in 3-flavor QCD?*, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **129** (2004) 614–616, [hep-lat/0309116].
- [53] H. Leutwyler and A. Smilga, *Spectrum of dirac operator and role of winding number in QCD*, Phys. Rev. **D46** (1992) 5607–5632.
- [54] J. Polonyi, H. W. Wyld, J. B. Kogut, J. Shigemitsu, and D. K. Sinclair, *Finite temperature phase transitions in SU(3) lattice gauge theory with dynamical, light fermions*, Phys. Rev. Lett. **53** (1984) 644.
- [55] M. Fukugita and A. Ukawa, *Deconfining and chiral transitions of finite temperature quantum chromodynamics in the presence of dynamical quark loops*, Phys. Rev. Lett. **57** (1986) 503.
- [56] **MILC** Collaboration, C. W. Bernard *et al.*, *QCD thermodynamics with an improved lattice action*, Phys. Rev. **D56** (1997) 5584–5595, [hep-lat/9703003].
- [57] **DIK** Collaboration, V. G. Bornyakov *et al.*, *Finite temperature QCD with two flavors of non-perturbatively improved wilson fermions*, Phys. Rev. **D71** (2005) 114504, [hep-lat/0401014].
- [58] **MILC** Collaboration, C. Bernard *et al.*, *QCD thermodynamics with three flavors of improved staggered quarks*, Phys. Rev. **D71** (2005) 034504, [hep-lat/0405029].
- [59] M. Cheng *et al.*, *The transition temperature in QCD*, Phys. Rev. **D74** (2006) 054507, [hep-lat/0608013].
- [60] B. Spang, <http://www.cheresources.com/iapwsif97.shtml>, .
- [61] Z. Fodor, S. D. Katz, K. K. Szabo, and A. I. Toth, *Grand canonical potential for a static quark anti-quark pair at mu not equal 0*, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **140** (2005) 508–510, [hep-lat/0410032].

- [62] G. Boyd *et al.*, *Thermodynamics of $SU(3)$ lattice gauge theory*, Nucl. Phys. **B469** (1996) 419–444, [[hep-lat/9602007](#)].
- [63] **CP-PACS** Collaboration, M. Okamoto *et al.*, *Equation of state for pure $SU(3)$ gauge theory with renormalization group improved action*, Phys. Rev. **D60** (1999) 094510, [[hep-lat/9905005](#)].
- [64] **CP-PACS** Collaboration, Y. Namekawa *et al.*, *Thermodynamics of $SU(3)$ gauge theory on anisotropic lattices*, Phys. Rev. **D64** (2001) 074507, [[hep-lat/0105012](#)].
- [65] **CP-PACS** Collaboration, A. Ali Khan *et al.*, *Equation of state in finite-temperature QCD with two flavors of improved wilson quarks*, Phys. Rev. **D64** (2001) 074510, [[hep-lat/0103028](#)].
- [66] J. Engels, J. Fingberg, F. Karsch, D. Miller, and M. Weber, *Nonperturbative thermodynamics of $SU(n)$ gauge theories*, Phys. Lett. **B252** (1990) 625–630.
- [67] I. M. Barbour, S. E. Morrison, E. G. Klepfish, J. B. Kogut, and M.-P. Lombardo, *Results on finite density QCD*, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **60A** (1998) 220–234, [[hep-lat/9705042](#)].
- [68] P. Hasenfratz and F. Karsch, *Chemical potential on the lattice*, Phys. Lett. **B125** (1983) 308.
- [69] Z. Fodor and S. D. Katz, *A new method to study lattice QCD at finite temperature and chemical potential*, Phys. Lett. **B534** (2002) 87–92, [[hep-lat/0104001](#)].
- [70] A. M. Ferrenberg and R. H. Swendsen, *New monte carlo technique for studying phase transitions*, Phys. Rev. Lett. **61** (1988) 2635–2638.
- [71] A. M. Ferrenberg and R. H. Swendsen, *Optimized monte carlo analysis*, Phys. Rev. Lett. **63** (1989) 1195–1198.
- [72] C.-N. Yang and T. D. Lee, *Statistical theory of equations of state and phase transitions. i: Theory of condensation*, Phys. Rev. **87** (1952) 404–409.
- [73] T. D. Lee and C.-N. Yang, *Statistical theory of equations of state and phase transitions. ii: Lattice gas and ising model*, Phys. Rev. **87** (1952) 410–419.
- [74] H. Kluberg-Stern, A. Morel, and B. Petersson, *Spectrum of lattice gauge theories with fermions from a $1/d$ expansion at strong coupling*, Nucl. Phys. **B215** (1983) 527.

- [75] M. P. Grady, D. K. Sinclair, and J. B. Kogut, *Hadron spectra and potential screening for lattice QCD with dynamical quarks*, Phys. Lett. **B200** (1988) 149.
- [76] K. D. Born, E. Laermann, N. Pirch, T. F. Walsh, and P. M. Zerwas, *Hadron properties in lattice QCD with dynamical fermions*, Phys. Rev. **D40** (1989) 1653–1663.
- [77] M. Golterman, Y. Shamir, and B. Svetitsky, *Breakdown of staggered fermions at nonzero chemical potential*, Phys. Rev. **D74** (2006) 071501, [[hep-lat/0602026](#)].
- [78] Z. Fodor and S. D. Katz, *Lattice determination of the critical point of QCD at finite t and μ* , JHEP **03** (2002) 014, [[hep-lat/0106002](#)].
- [79] F. Csikor, Z. Fodor, and J. Heitger, *Endpoint of the hot electroweak phase transition*, Phys. Rev. Lett. **82** (1999) 21–24, [[hep-ph/9809291](#)].
- [80] Z. Fodor and S. D. Katz, *Critical point of QCD at finite t and μ , lattice results for physical quark masses*, JHEP **04** (2004) 050, [[hep-lat/0402006](#)].
- [81] Z. Fodor, S. D. Katz, and K. K. Szabo, *The QCD equation of state at nonzero densities: Lattice result*, Phys. Lett. **B568** (2003) 73–77, [[hep-lat/0208078](#)].
- [82] F. Csikor *et al.*, *Equation of state at finite temperature and chemical potential, lattice QCD results*, JHEP **05** (2004) 046, [[hep-lat/0401016](#)].
- [83] C. R. Allton *et al.*, *The QCD thermal phase transition in the presence of a small chemical potential*, Phys. Rev. **D66** (2002) 074507, [[hep-lat/0204010](#)].
- [84] P. de Forcrand and O. Philipsen, *The QCD phase diagram for small densities from imaginary chemical potential*, Nucl. Phys. **B642** (2002) 290–306, [[hep-lat/0205016](#)].
- [85] M. D’Elia and M.-P. Lombardo, *Finite density QCD via imaginary chemical potential*, Phys. Rev. **D67** (2003) 014505, [[hep-lat/0209146](#)].
- [86] R. V. Gavai and S. Gupta, *The critical end point of QCD*, Phys. Rev. **D71** (2005) 114014, [[hep-lat/0412035](#)].
- [87] C. R. Allton *et al.*, *The equation of state for two flavor QCD at non-zero chemical potential*, Phys. Rev. **D68** (2003) 014507, [[hep-lat/0305007](#)].

- [88] M. D’Elia and M. P. Lombardo, *QCD thermodynamics from an imaginary $\mu(b)$: Results on the four flavor lattice model*, Phys. Rev. **D70** (2004) 074509, [[hep-lat/0406012](#)].